

はじめにお読みください

この文章は、研究室に所属する学生が研究活動の一環として作成してくれたものです。研究室セミナーの時間に輪番で発表してもらい、研究に関連した事項の基礎知識の向上をはかりました。内容・文章ともに未だ不完全なものもありますが、2018 年度に調査してくれたものを公開いたします。

※学生の作成してくれたファイルをそのまま公開しております。ところどころ誤った記述もあるため、内容については保証いたしかねます。ご注意ください。
(2019 年度以降、少しずつ改訂していく予定です。)

2018 年 3 月 名古屋工業大学 川崎・石井研究室
<http://kawasaki.web.nitech.ac.jp/jp/tips/index.shtml>

【執筆者一覧】

・ 卒研究生

伊達 怜実、堀之内 理紗、山田 えみり、吉谷 駿、渡邊 裕介

・ M1

浅井 七海、亀岡 真祐子、近藤 航平、長谷川 毅、横井 和真、高橋 実夏子

・ M2

石亀 弘基、久野 潤也、中村 元海、林 遼治、松下 一樹、眞鍋 駿

・ D3

李 蒼昊

【X線回折】

JCPDS カードって何ですか？

作成日： 2018 年 4 月 17 日

担当者： 堀之内 理紗

JCPDSカードとは、各結晶の特徴的な格子面間隔、相対強度、物理的・結晶学的特性などを示した、単相の粉末X線回折パターンのデータ集であり、結晶材料の相同定に使用されています。JCPDSカードの収録データは、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おり、ICDDという非営利科学組織が収集、編集、販売しています。また、JSPDSカードのデータベースは、ICDDが独自に収集した粉末回折データだけでなく、アメリカ商務省標準技術局(NIST)およびドイツ専門情報センター(FIZ)から提供されるICSD、ケンブリッジ結晶学データセンター(CCDC)から提供されるCSD、マテリアルフェーズデータシステム(MPDS)から提供されるLPFからのデータも含まれています。

JCPDSカードは主に4種類に分かれており、PDF-2、PDF-4+、PDF-4/Minerals、PDF-4/Organicsに分類されています。この中でもPDF-4/MineralsはPDF-4+に収録されているデータのうち鉱物関連データに限定されたサブセットという位置づけになっています。PDF-4シリーズの製品であるPDF-4+、PDF-4/Minerals、PDF-4/Organicsのライセンスの有効期間は、いずれも1年間に限定されており、使用を継続するために毎年更新料を支払う必要があります。PDF-2のライセンス期間は5年間に設定されていますが、無料でさらに5年間延長することが可能なので、一度購入すれば10年間の間、更新料を支払わなくても継続して使用することが可能です。4種類のデータベースの特徴を下記のTable 1にまとめました。

Table 1 JCPDSカードの分類

	PDF-2	PDF-4+	PDF-4/Minerals	PDF-4/Organics
無機化合物の解析	○	○	○	
有機化合物の解析				○
鉱物の解析			○	
電子線回折のデータの解析		○	○	○
シンクロトロンデータの解析		○	○	○
定量分析				
リートベルト解析		○ 注1	○ 注1	○ 注1
RIR (Reference Intensity Ratio)	○ 注1	○	○	○
パターンフィッティング		○	○	○
原子座標のデータ		○	○	○
データベースの登録件数	298,258	398,726	45,497	526,126
ライセンス期間	5年	1年	1年	1年

注1：解析には別途、サードパーティ製ソフトが必要

各 PDF データに含まれる内容を以下にまとめました。

PDF-4 製品

PDF-4 製品には PDF-2 には含まれていない原子の座標の情報やデジタル回折パターンなど、多くの情報が収録されています。PDF-4+と PDF-4/Minerals には LPF から計算、標準化されたデータが含まれており、PDF-4/Organics のみに CSD から計算、標準化されたデータが含まれています。

・ PDF-4+

無機物の回折データ、物理特性、結晶データ、文献情報などの巨大なデータベースです。デジタルパターン、分子グラフィックス、原子パラメータなどの機能も含んでいます。

・ PDF-4/Minerals

鉱物及び鉱物関連のデータベースです。分類されている鉱物のうち 97%以上の鉱物種をカバーしているだけでなく、まだ分類されていない鉱物、合成物、中間層および固溶体による変種も含んでいます。

・ PDF-4/Organics

有機物の粉末 X 線回折データベースです。製薬や特殊化学産業を対象とした材料識別用に設計されています。

PDF-2 製品

粉末回折データベースの最新バージョンであり、X 線回折装置を使った無機材料分析で利用されるように設計されています。物理的特性（化学式、化合物名、鉱物名、構造式、晶系、融点や密度など）、測定条件、文献情報などが収録されており、各登録データには、格子面間隔（d）、相対強度、ミラー指数の情報も載っています。ただし、原子の座標データは含まれていません。

参考文献

[1] <http://www.icdd.com/translation/jp/pdf4.htm>

[2] http://www.crl.nitech.ac.jp/~ida/research/preprints/how_to_use_pxrds_5.pdf