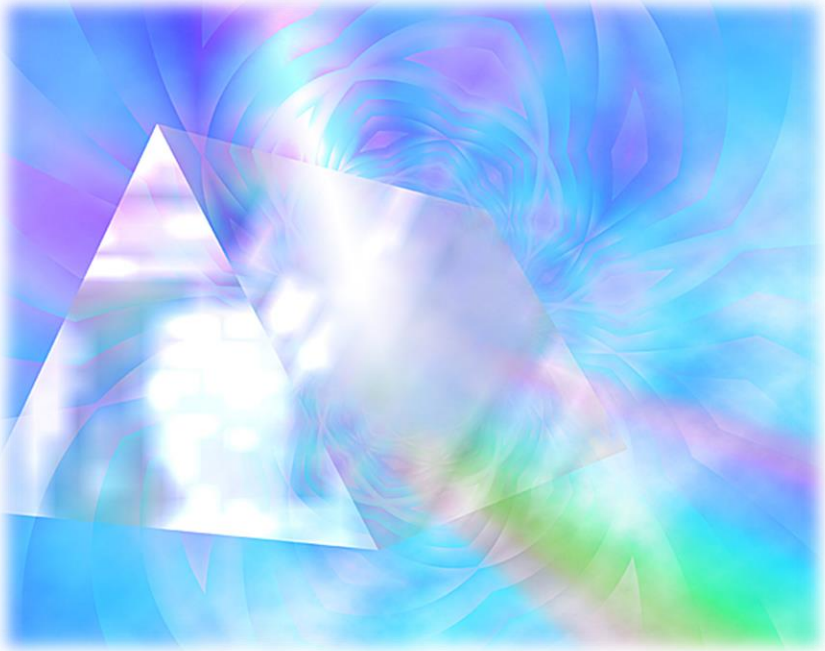
無機結晶構造データベース（ICSD）のご紹介

まずは検索画面から。

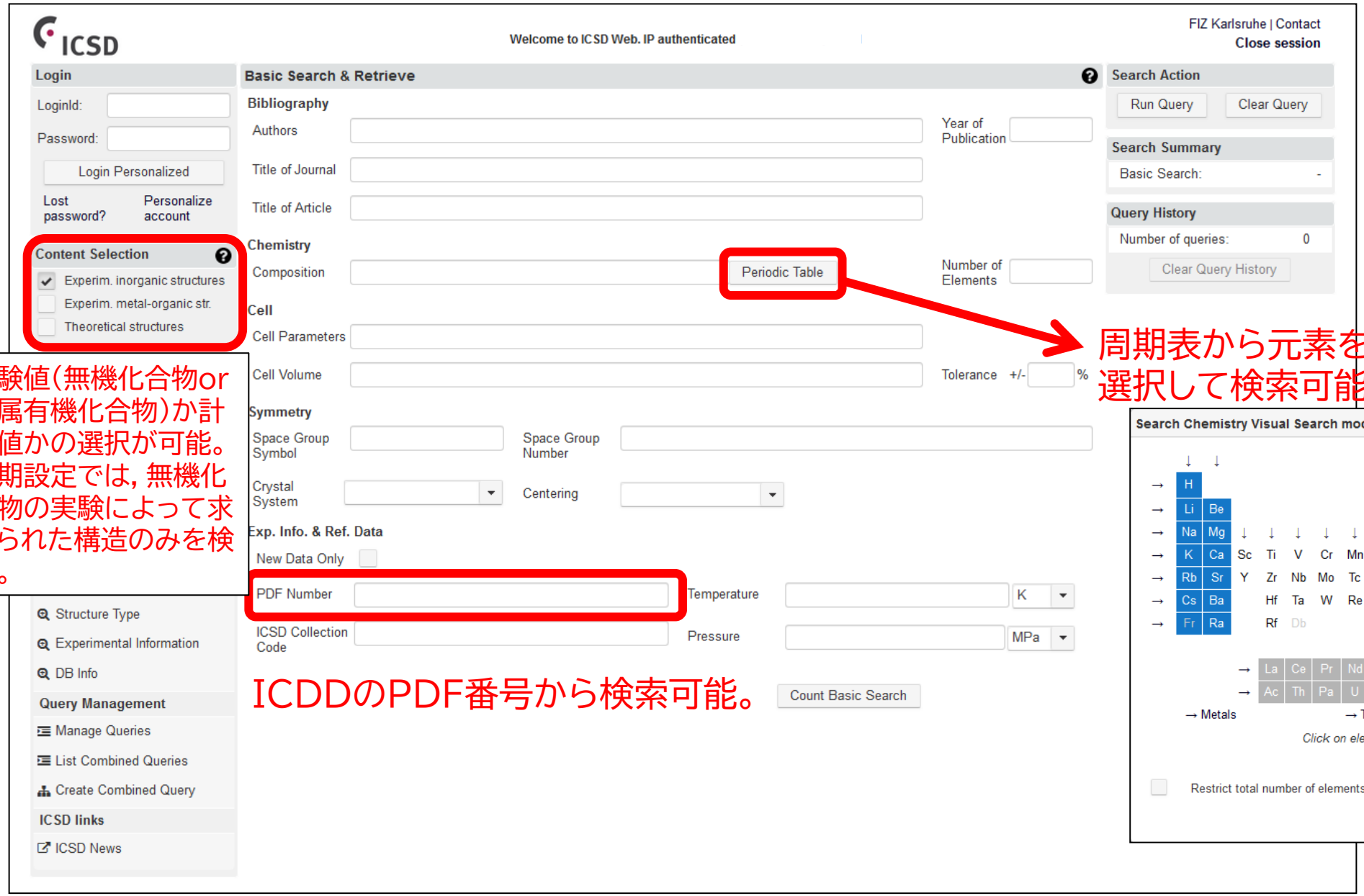


JAICI
情報で、科学をひらく

ICSD
FIZ Karlsruhe

2025年8月版

■検索初期画面 （ベーシックサーチ画面：よく使われる検索項目を1ページにまとめた画面）

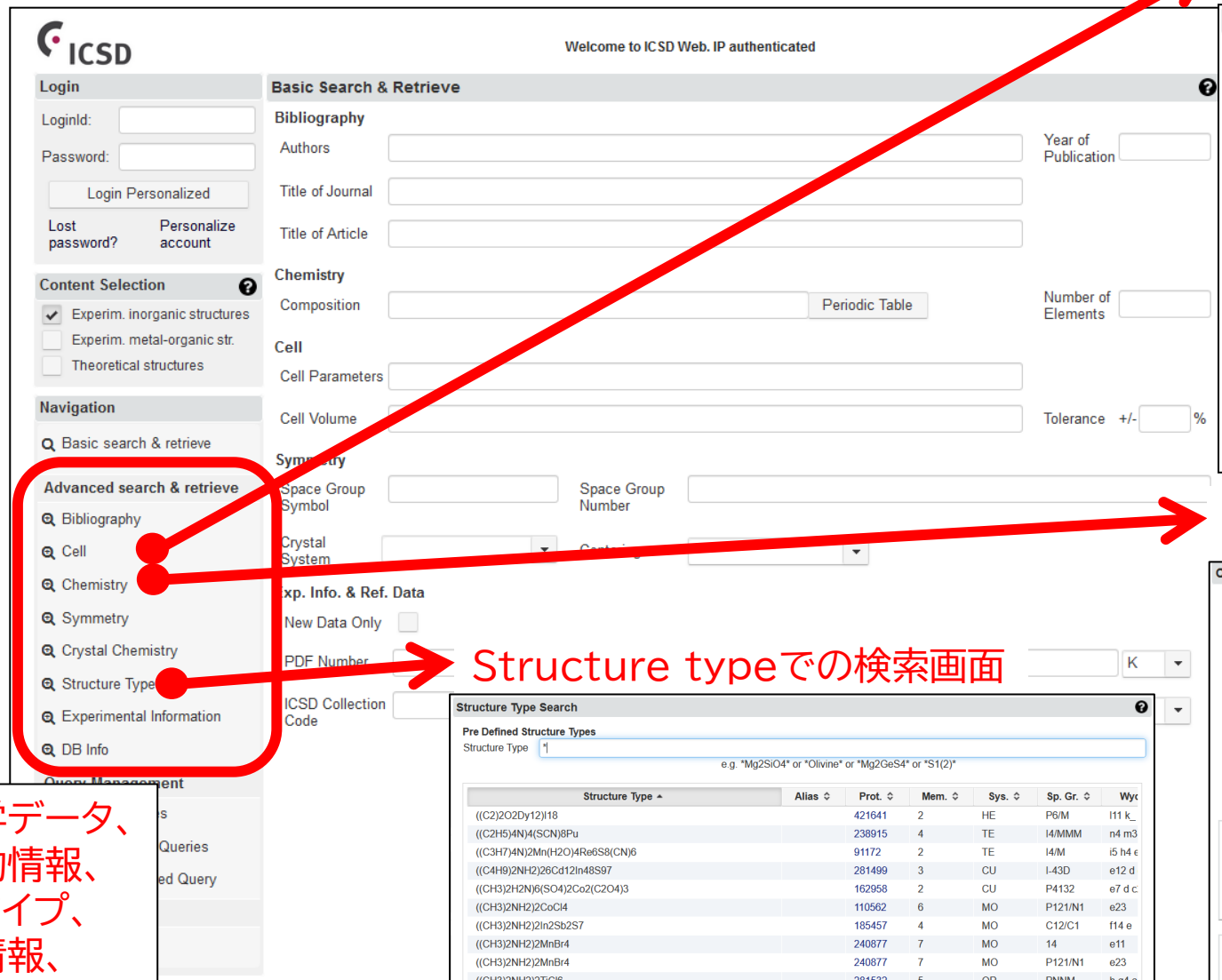


実験値(無機化合物or金属有機化合物)か計算値かの選択が可能。初期設定では，無機化合物の実験によって求められた構造のみを検索。

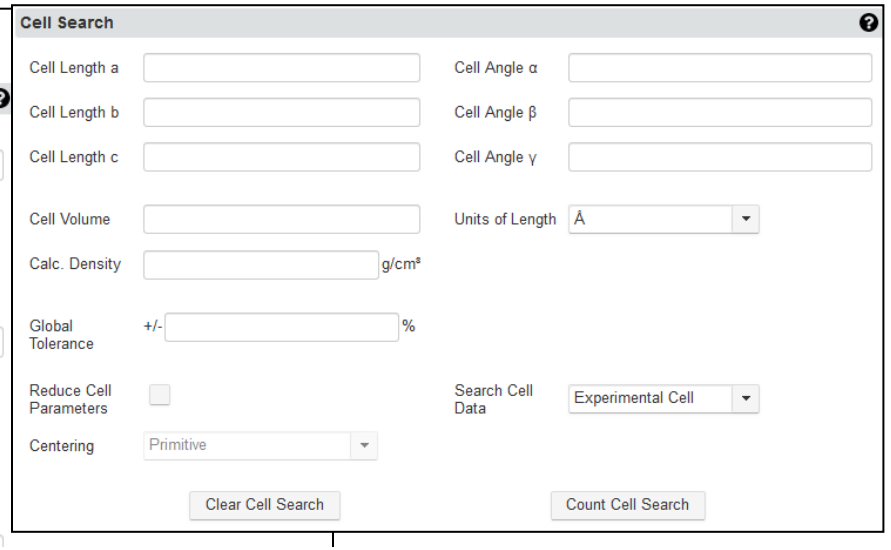
周期表から元素を選択して検索可能。

ICDDのPDF番号から検索可能。

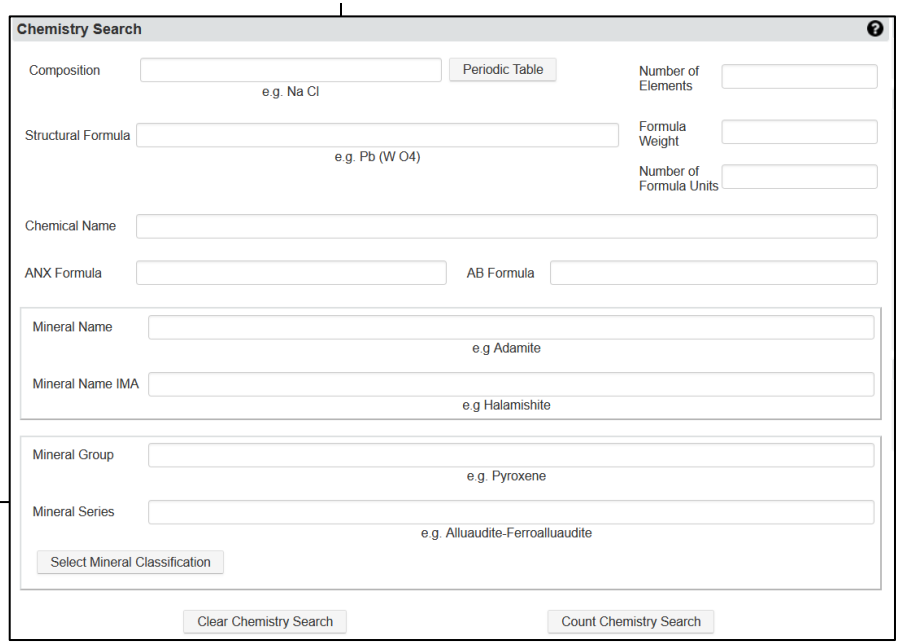
■詳細検索画面例（アドバンスドサーチ画面）



格子定数からの検索画面



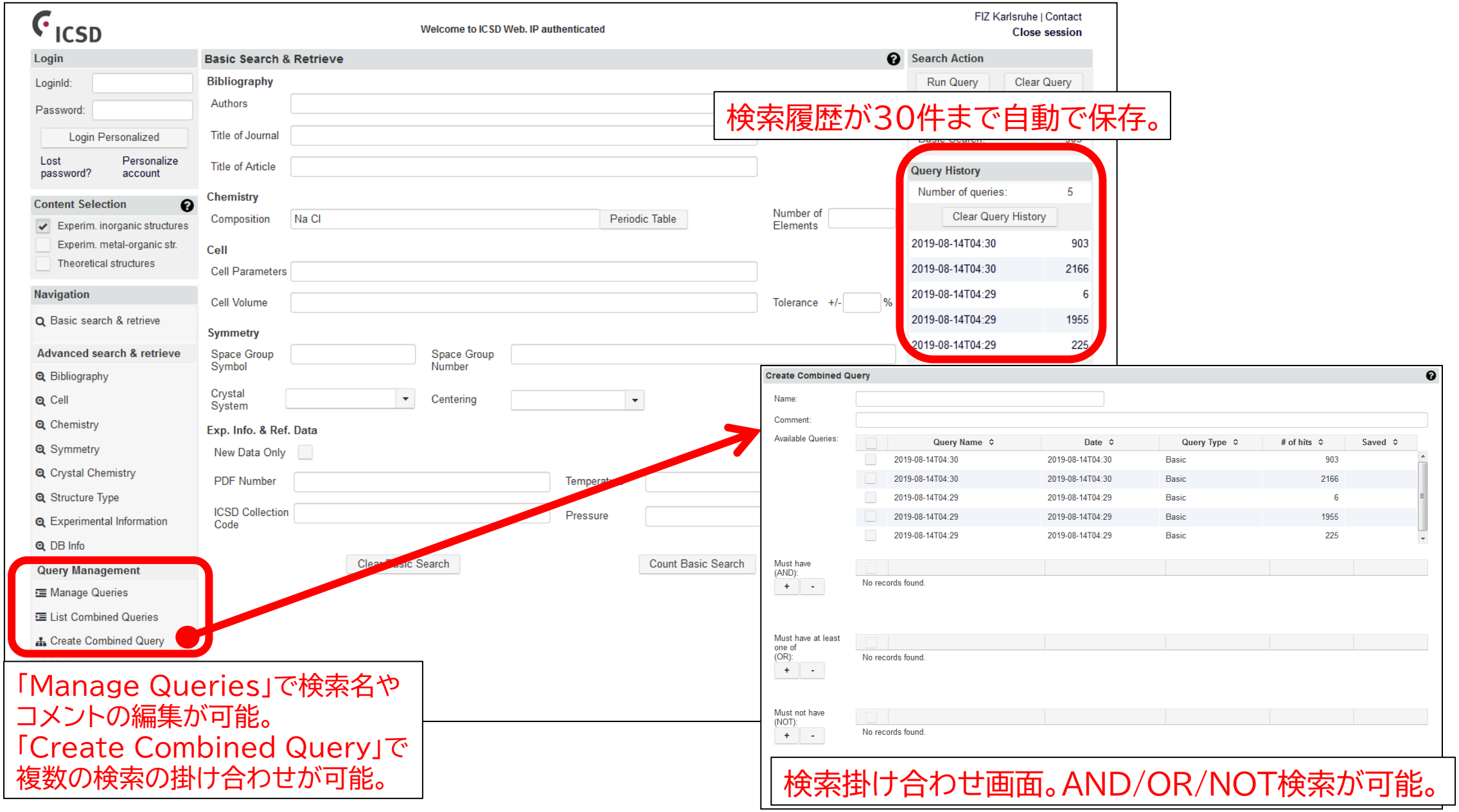
化合物情報からの検索画面



Structure typeでの検索画面

結晶学データ、
化合物情報、
構造タイプ、
測定情報、
書誌情報
などからの
詳細な検索
が可能。

■検索の掛け合わせ画面


ICSD
Welcome to ICSD Web. IP authenticated
FIZ Karlsruhe | Contact
Close session
Login
LoginId:
Password:
Login Personalized
Lost password?
Personalize account
Content Selection
Experim. inorganic structures
Experim. metal-organic str.
Theoretical structures
Navigation
Basic search & retrieve
Advanced search & retrieve
Bibliography
Cell
Chemistry
Symmetry
Crystal Chemistry
Structure Type
Experimental Information
DB Info
Query Management
Manage Queries
List Combined Queries
Create Combined Query
Basic Search & Retrieve
Bibliography
Authors
Title of Journal
Title of Article
Chemistry
Composition
Na Cl
Periodic Table
Number of Elements
Cell
Cell Parameters
Cell Volume
Tolerance +/- %
Symmetry
Space Group Symbol
Space Group Number
Crystal System
Centering
Exp. Info. & Ref. Data
New Data Only
PDF Number
ICSD Collection Code
Pressure
Count Basic Search
Search Action
Run Query
Clear Query
検索履歴が30件まで自動で保存。
Query History
Number of queries: 5
Clear Query History
2019-08-14T04:30 903
2019-08-14T04:30 2166
2019-08-14T04:29 6
2019-08-14T04:29 1955
2019-08-14T04:29 225
Create Combined Query
Name:
Comment:
Available Queries:
Query Name
Date
Query Type
# of hits
Saved
Must have (AND):
Must have at least one of (OR):
Must not have (NOT):
No records found.
「Manage Queries」で検索名やコメントの編集が可能。
「Create Combined Query」で複数の検索の掛け合わせが可能。
検索掛け合わせ画面。AND/OR/NOT検索が可能。

JAIOI
情報で、科学をひらく

次に検索結果画面を紹介します。

ICSD
FIZ Karlsruhe

■レコード画面例1

ICSD

Welcome to ICSD Web. IP authenticated

CIF形式での出力やプリンターでの印刷

Detailed View　Entry 329 of 4373

Back to Query | Back to List | CCDC | Export Cif | Print | Feedback to Editor

Summary　Collection Code 62388

Struct. formula	Ca Mo6 S8	Structure type	Mo6PbS8
Cell parameter	6.5146(5) 6.5146(5) 6.5146(5) 89.63(1) 89.63(1) 89.63(1)	Space group	R -3 R (148)
Cell volume	276.46 [Å³]	Z	1
Temperature	room temperature	Pressure	atmospheric
Data quality	High quality	R-value	0.032
Author	Kubel, F.; Yvon, K.;	Title	Matrix Effect in Chevrel Phases Containing Divalent Metal Cations. The Structure of Rhombohedral CaMo6S8
Reference	Journal of Solid State Chemistry (1988) 73, p. 188-191	Fulltext	Get full text by DOI　Search full text by Google Scholar
See also	CCDC structures depot　OQMD - Open Quantum Materials Database　Materials Project property set 1/1		

レコードのサマリー

←関連外部サイトへのリンク

Details　Expand all　Collapse all

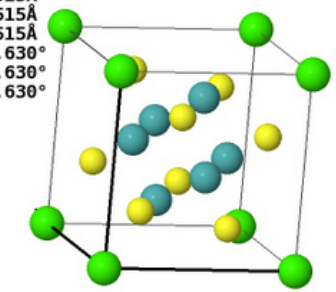
Visualization

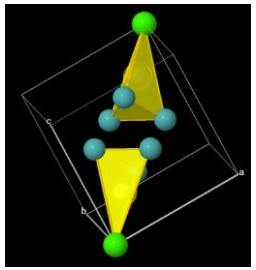
↓ここからレコードの詳細。
次ページにも続く。

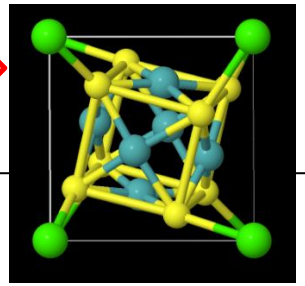
3次元構造の表示

Published Crystal Structure

148 #148:r
a=6.515Å
b=6.515Å
c=6.515Å
α=89.630°
β=89.630°
γ=89.630°





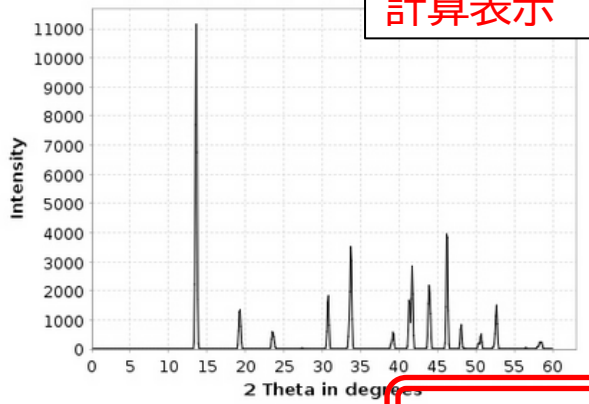


Interactive Visualization

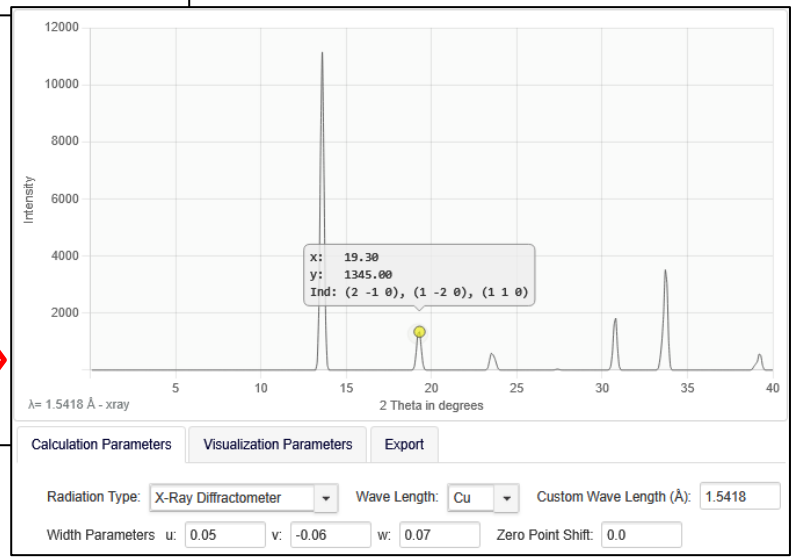
原子間距離・角度の表示、配位状況の表示等が可能。

粉末X線回折パターンの計算表示

Powder Pattern

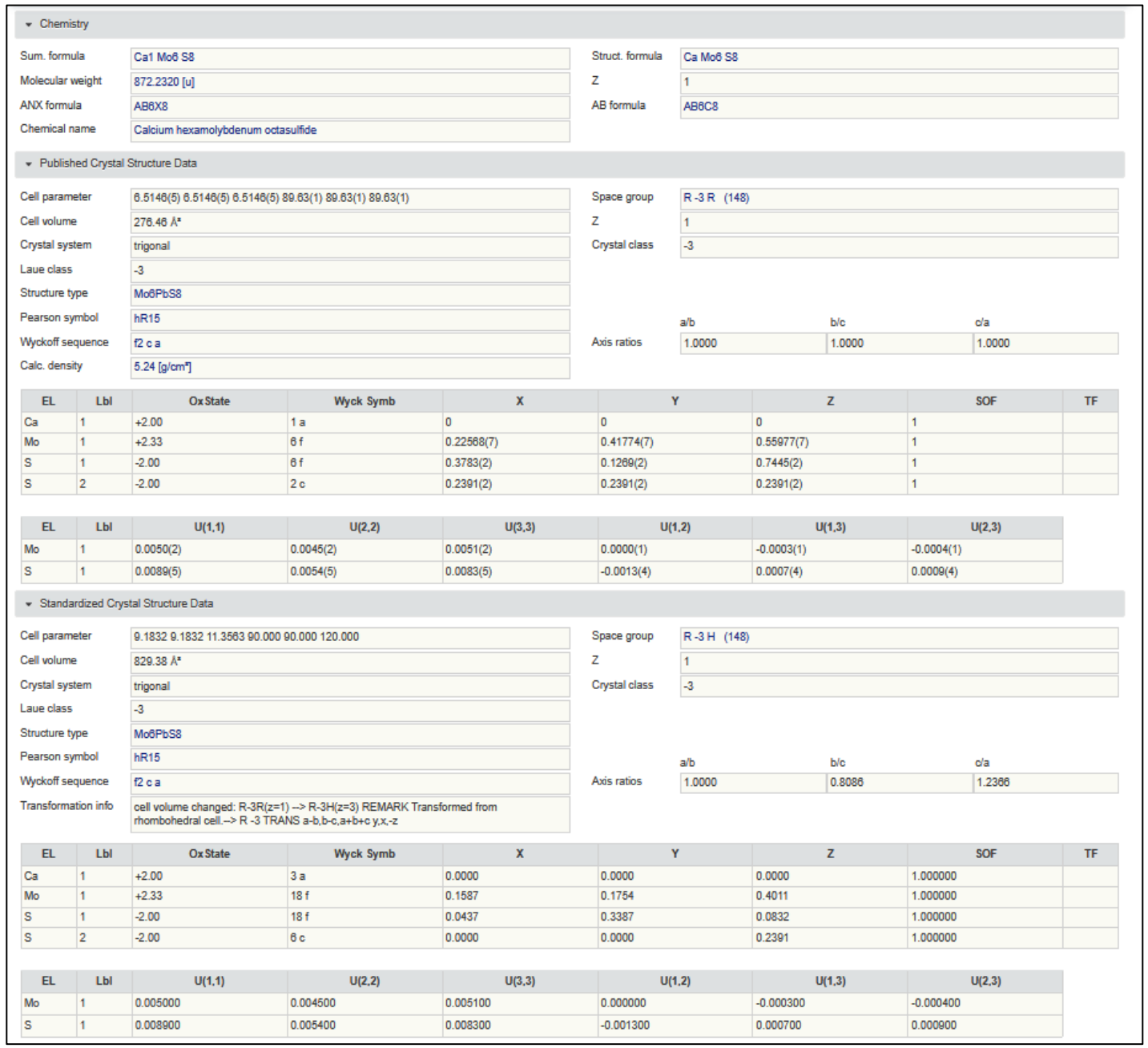


Interactive Visualization



線源の選択や任意の波長の設定、中性子回折パターンの表示、横軸の表示範囲の変更などが可能。

■レコード画面例2



Chemistry

Sum. formula	Ca1 Mo6 S8	Struct. formula	Ca Mo6 S8
Molecular weight	872.2320 [u]	Z	1
ANX formula	AB6X8	AB formula	AB6C8
Chemical name	Calcium hexamolybdenum octasulfide		

Published Crystal Structure Data

Cell parameter	6.5146(5) 6.5146(5) 6.5146(5) 89.63(1) 89.63(1) 89.63(1)	Space group	R -3 R (148)		
Cell volume	276.46 Å³	Z	1		
Crystal system	trigonal	Crystal class	-3		
Laue class	-3				
Structure type	Mo6PbS8				
Pearson symbol	hR15				
Wyckoff sequence	f2 c a		a/b	b/c	c/a
Calc. density	5.24 [g/cm³]	Axis ratios	1.0000	1.0000	1.0000

EL	Lbl	Ox State	Wyck Symb	X	Y	Z	SOF	TF
Ca	1	+2.00	1 a	0	0	0	1	
Mo	1	+2.33	6 f	0.22568(7)	0.41774(7)	0.55977(7)	1	
S	1	-2.00	6 f	0.3783(2)	0.1269(2)	0.7445(2)	1	
S	2	-2.00	2 c	0.2391(2)	0.2391(2)	0.2391(2)	1	

EL	Lbl	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
Mo	1	0.0050(2)	0.0045(2)	0.0051(2)	0.0000(1)	-0.0003(1)	-0.0004(1)
S	1	0.0089(5)	0.0054(5)	0.0083(5)	-0.0013(4)	0.0007(4)	0.0009(4)

Standardized Crystal Structure Data

Cell parameter	9.1832 9.1832 11.3563 90.000 90.000 120.000	Space group	R -3 H (148)		
Cell volume	829.38 Å³	Z	1		
Crystal system	trigonal	Crystal class	-3		
Laue class	-3				
Structure type	Mo6PbS8				
Pearson symbol	hR15		a/b	b/c	c/a
Wyckoff sequence	f2 c a	Axis ratios	1.0000	0.8086	1.2366
Transformation info	cell volume changed: R-3R(z=1) --> R-3H(z=3) REMARK Transformed from rhombohedral cell.--> R -3 TRANS a-b,b-c,a+b+c y,x,-z				

EL	Lbl	Ox State	Wyck Symb	X	Y	Z	SOF	TF
Ca	1	+2.00	3 a	0.0000	0.0000	0.0000	1.000000	
Mo	1	+2.33	18 f	0.1587	0.1754	0.4011	1.000000	
S	1	-2.00	18 f	0.0437	0.3387	0.0832	1.000000	
S	2	-2.00	6 c	0.0000	0.0000	0.2391	1.000000	

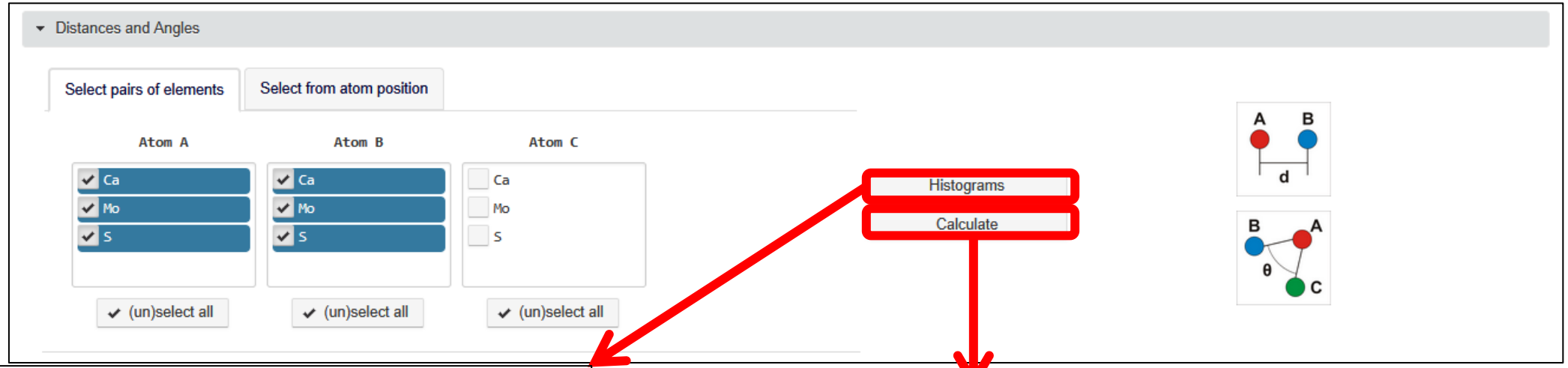
EL	Lbl	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
Mo	1	0.005000	0.004500	0.005100	0.000000	-0.000300	-0.000400
S	1	0.008900	0.005400	0.008300	-0.001300	0.000700	0.000900

化合物情報、分子式タイプ、鉱物名など

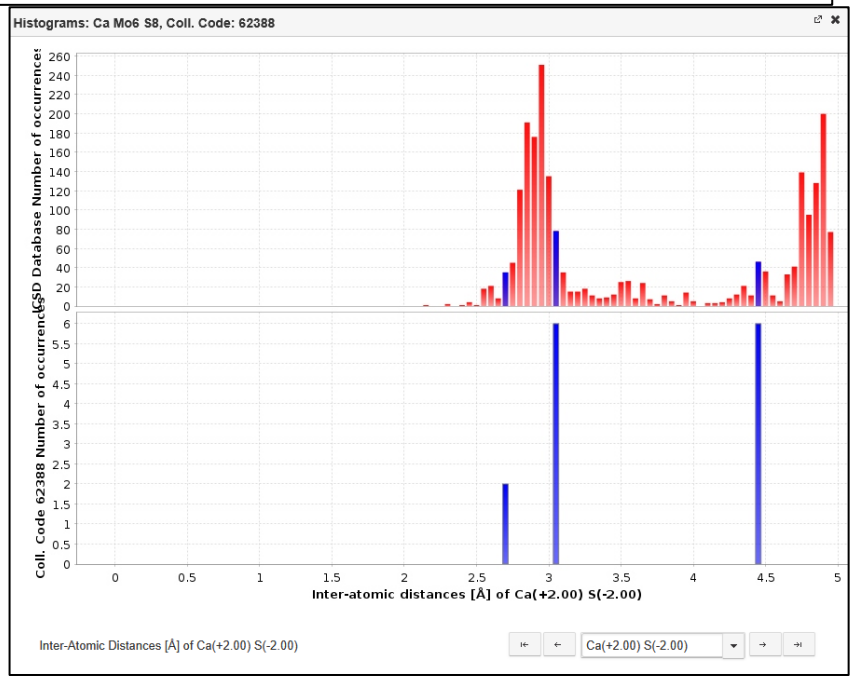
文献中に記載されている格子定数、空間群、原子座標などの結晶学データ

スタンダードなセッティングに変換した場合の格子定数、空間群、原子座標などの結晶学データ

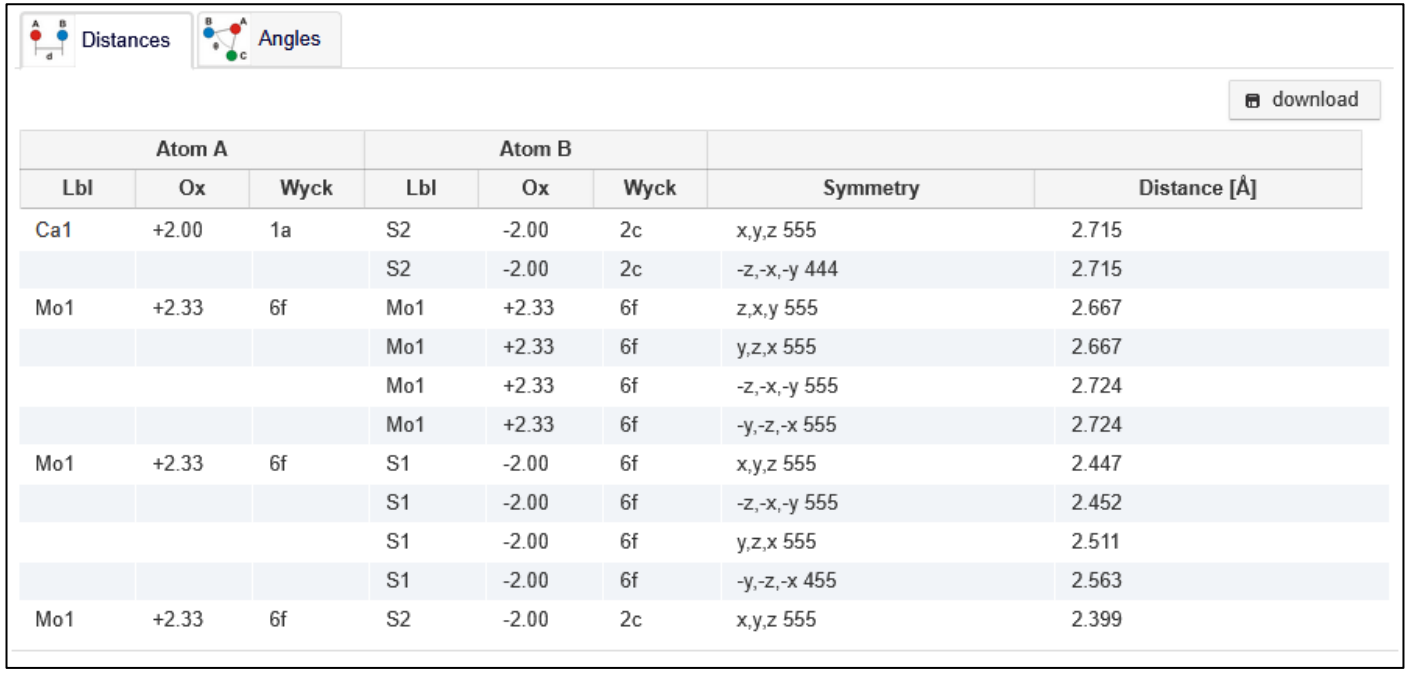
■レコード画面例3



特定の原子間距離の分布のプロットが可能。
（例：Ca^{2+} - S^{2-} 間の距離）



原子間距離・角度の計算が可能。



Atom A			Atom B				
Lbl	Ox	Wyck	Lbl	Ox	Wyck	Symmetry	Distance [Å]
Ca1	+2.00	1a	S2	-2.00	2c	x,y,z 555	2.715
			S2	-2.00	2c	-z,-x,-y 444	2.715
Mo1	+2.33	6f	Mo1	+2.33	6f	z,x,y 555	2.667
			Mo1	+2.33	6f	y,z,x 555	2.667
			Mo1	+2.33	6f	-z,-x,-y 555	2.724
			Mo1	+2.33	6f	-y,-z,-x 555	2.724
Mo1	+2.33	6f	S1	-2.00	6f	x,y,z 555	2.447
			S1	-2.00	6f	-z,-x,-y 555	2.452
			S1	-2.00	6f	y,z,x 555	2.511
			S1	-2.00	6f	-y,-z,-x 455	2.563
Mo1	+2.33	6f	S2	-2.00	2c	x,y,z 555	2.399

■レコード画面例4

書誌情報：DOI、Google Scholarのリンクあり。一部はabstractも収録。

▼ Bibliography

Author	Kubel, F.; Yvon, K.;	Title	Matrix Effect in Chevrel Phases Containing Divalent Metal Cations. The Structure of Rhombohedral CaMo6S8
Reference	Journal of Solid State Chemistry (1988) 73, p. 188-191	DOI	10.1016/0022-4596(88)90068-0
Get full text	by Google Scholar		

測定情報

▼ Experimental information

Temperature	room temperature	Pressure	atmospheric
Radiation type	X-Ray	Sample type	Single crystal
R-value	0.032		
PDF calc.	01-085-1269		
Remarks	Temperature factors available		

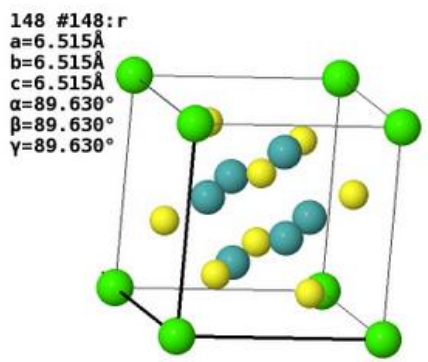
Additional Information

▼ Additional information

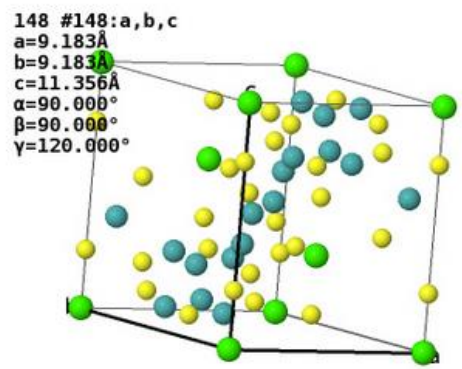
Comments	Hexagonal setting: 9.183, 11.35	Comments	Temperature factors for Ca(1) and S(2) are given in non-ICSD-standard form
Warnings	At least one temperature factor missing in the paper.		
Materials Project	Entry at Materials Explorer (1/1)		
OQMD	Entry in the Open Quantum Materials Database (OQMD)		

▼ Compare Published and Standardized Structure

Published Crystal Structure



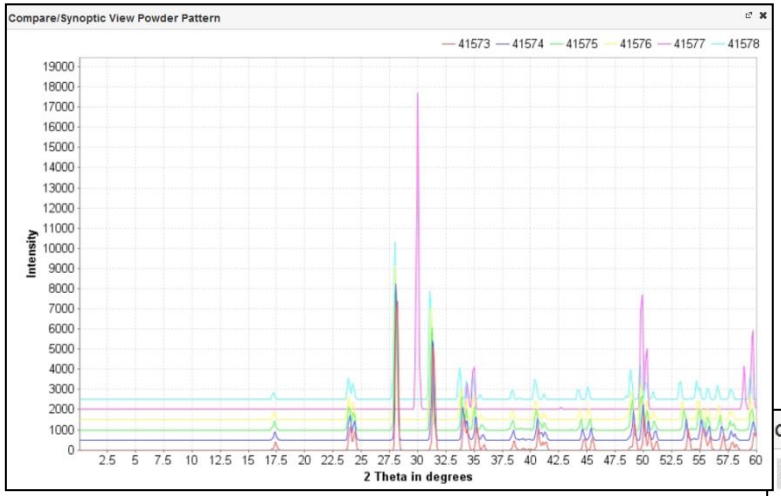
Standardized Crystal Structure

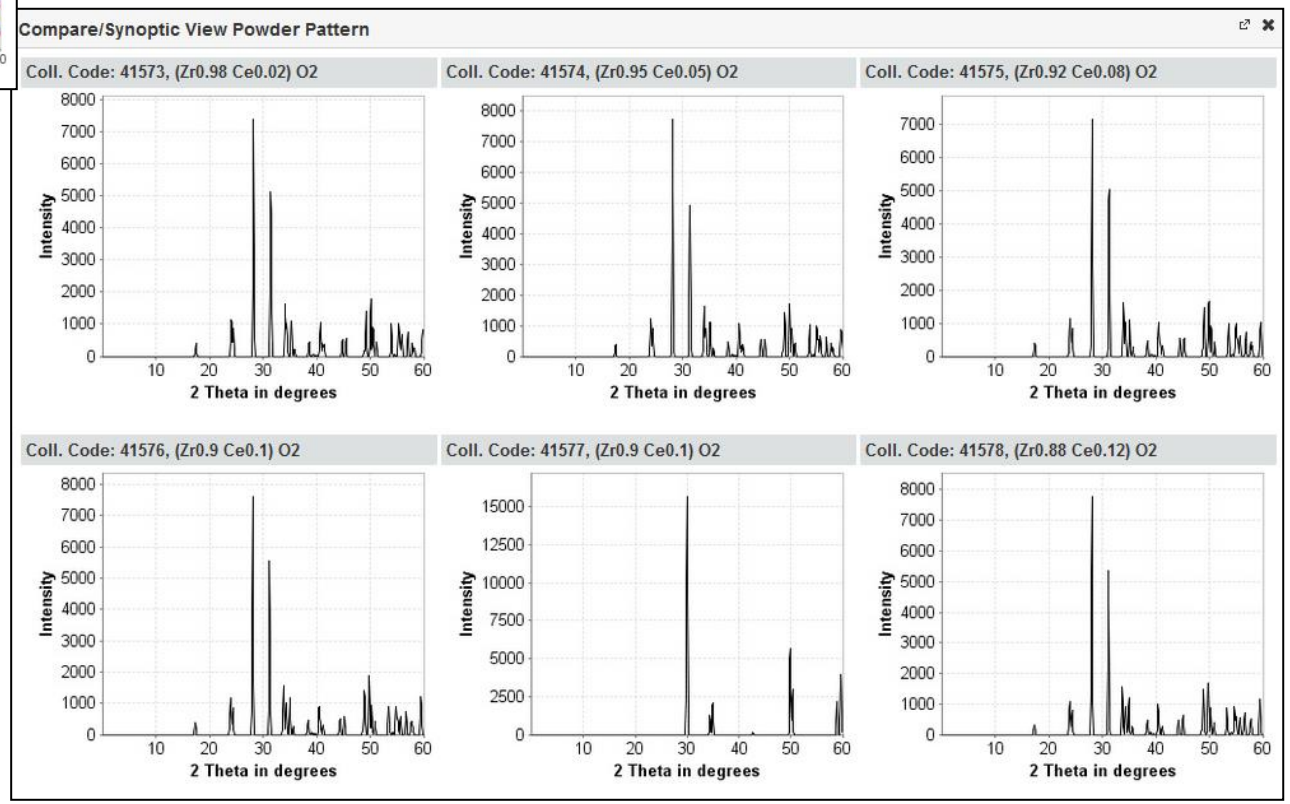


文献中に記載されている構造とスタンダードセッティングに変換した構造の比較。

★文献から結晶学データを収録するだけでなく、製作元の専門スタッフが、Additional informationのComment/Warning欄に、データの矛盾点や不足情報、コメントなどの価値ある付加情報を記載。

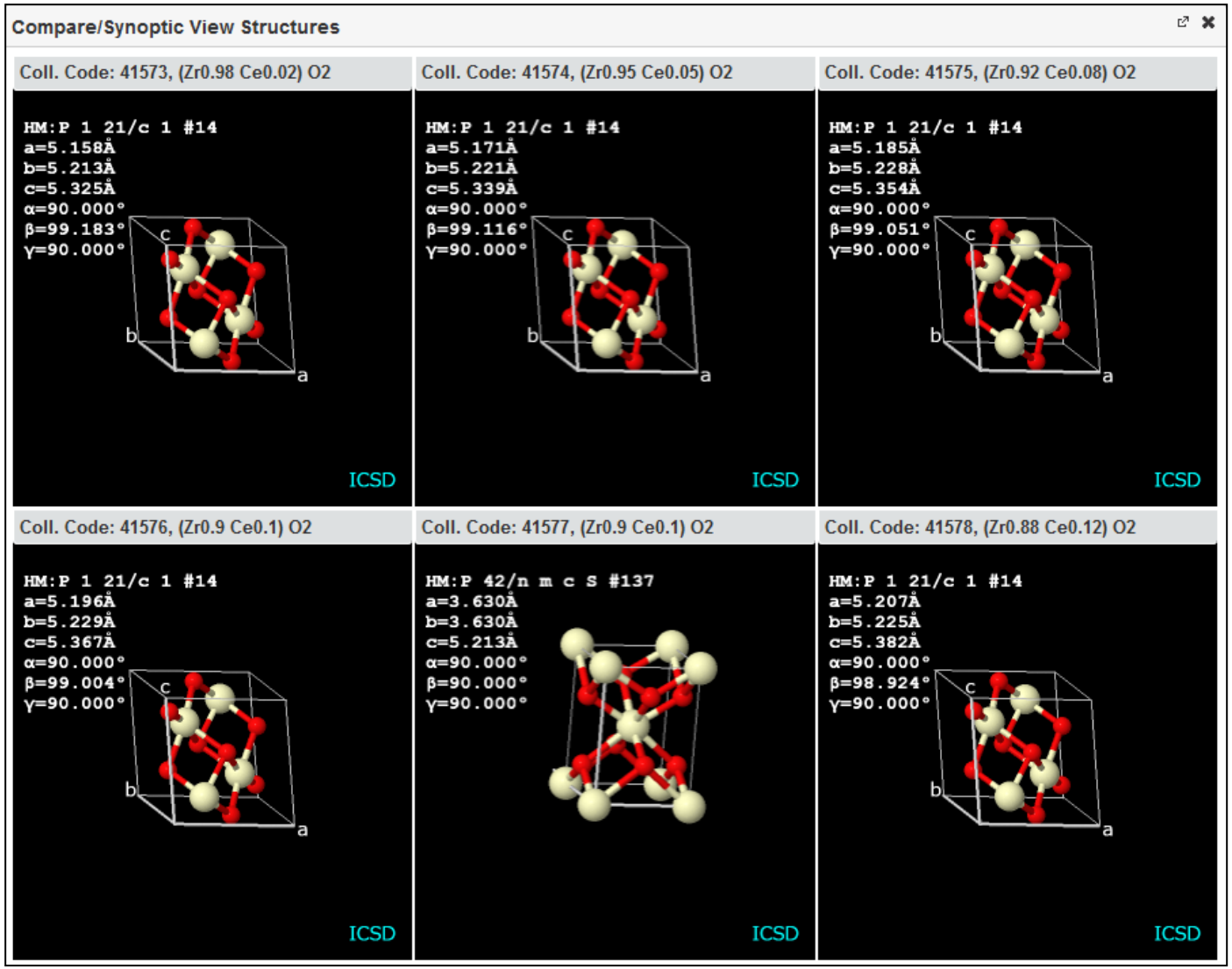
■その他の機能1





複数のレコードの粉末パターン
重ね合わせ表示や比較も可能。

■その他の機能2



複数のレコードの
構造比較も可能。

■ ICSDの機能や表示についてご質問や、オンラインでのご説明のご要望などがございましたら、
化学情報協会　科学データ情報室< crystal@jaici.or.jp >までお問い合わせください。

以上