

# CSD-Frameworks

## 多孔性材料開発向けCSDパッケージ

CSD-Frameworksは、CSD-CoreとCSD-Materialsに付属するツールから、MOFの構造表示、重ね合わせ、溶媒や水和物の解析、多孔構造の解析などの選りすぐりの機能をセットにしたパッケージです。CSDの全データ、および機械学習やデータマイニング用に前処理したMOF Collection (CIF)を提供いたします。

2025年7月

化学情報協会

科学データ情報室

# CSD-Frameworksの構成



## CSD : Cambridge Structural Database

130万件を超える結晶構造データベース

さらに、

**CSD MOF Collection** : 本パッケージのみに付属する、  
高品質な3D-MOF結晶構造ファイル集 (検索機能なし)



## Mercury : 構造可視化と解析機能

- Hydrate Analysis : 水和物の解析
- Solvate Analysis : 溶媒分子の解析
- Pore Analysis : 多孔構造の解析
- Powder Pattern : PXRDシミュレーション
- Motif Search : 指定した motif を持つ構造を検索
- Crystal Packing : 類似の packing を検索

## CSD活用ツール



**ConQuest** : 高度な3D検索に対応した、CSD検索ツール



**CSD Python API** : CSDと連携したワークフローを自動化



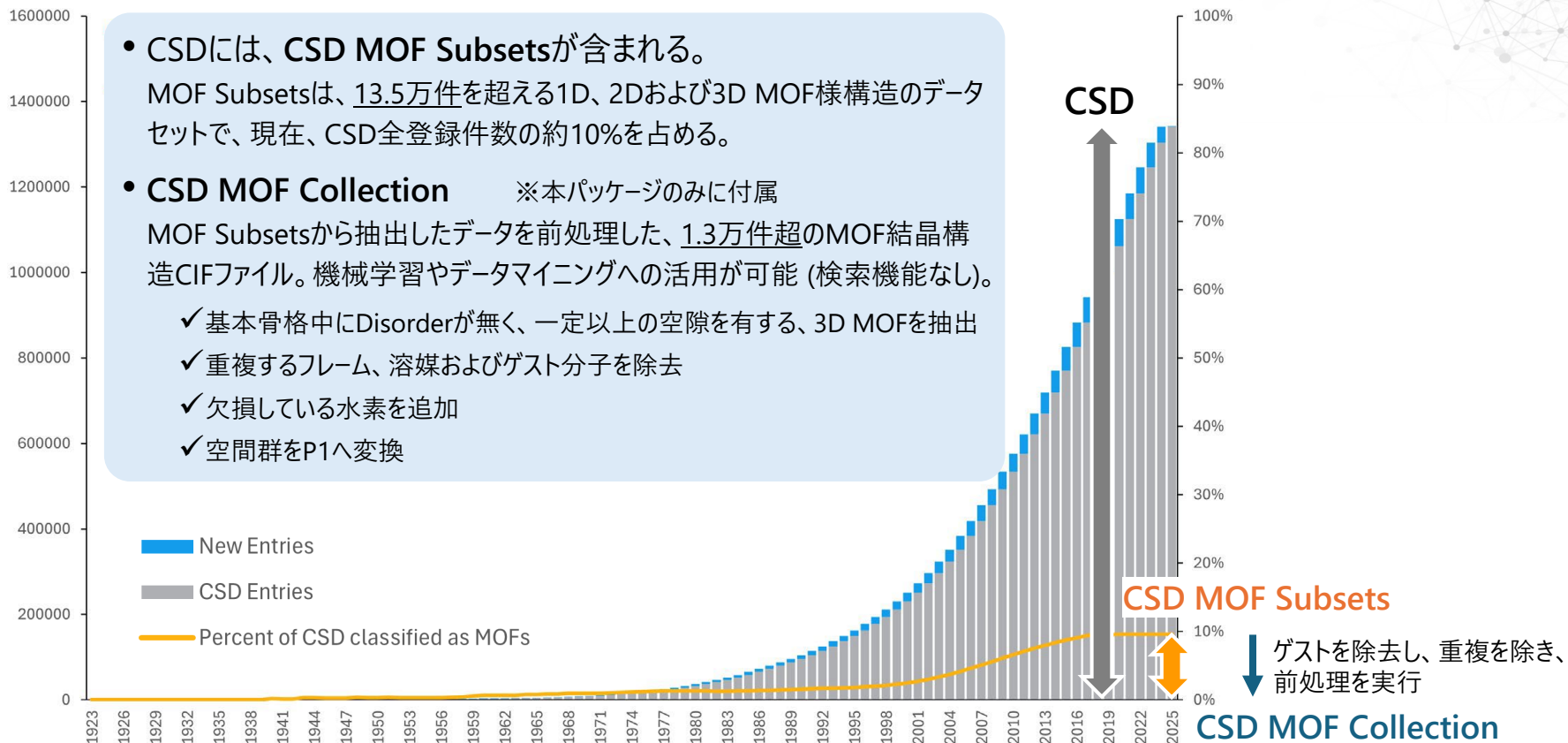
**CSD Editor** : in-houseのデータベース作成と管理



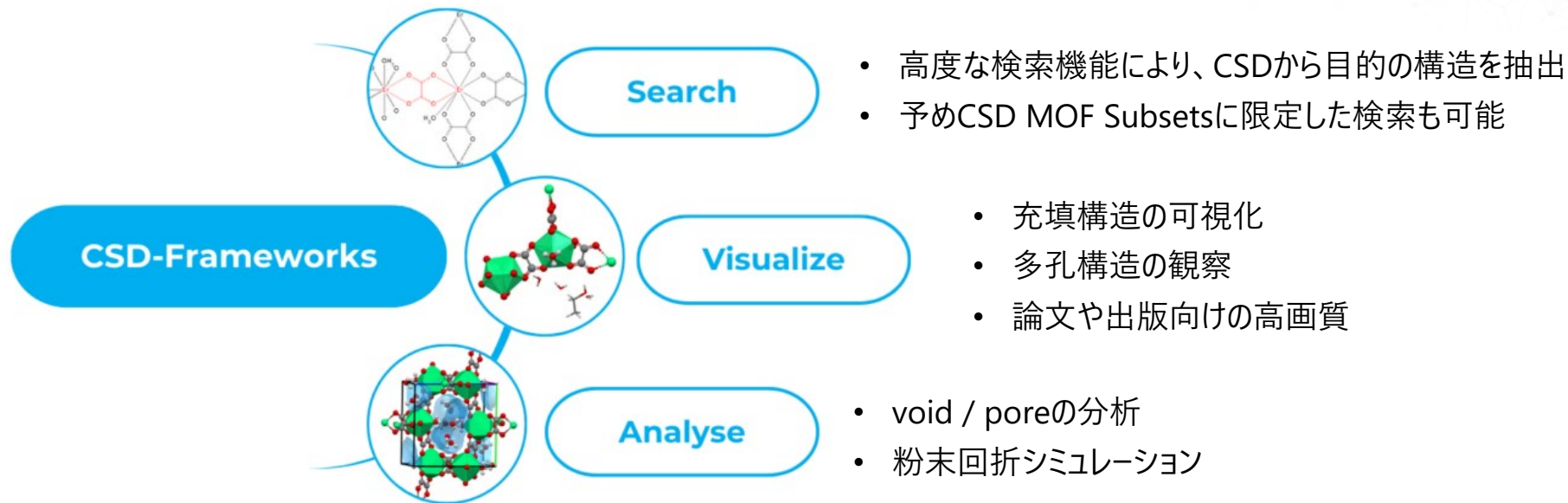
**WebCSD** : 入門レベルのオンライン検索



# CSD-Frameworksが提供するMOFデータ

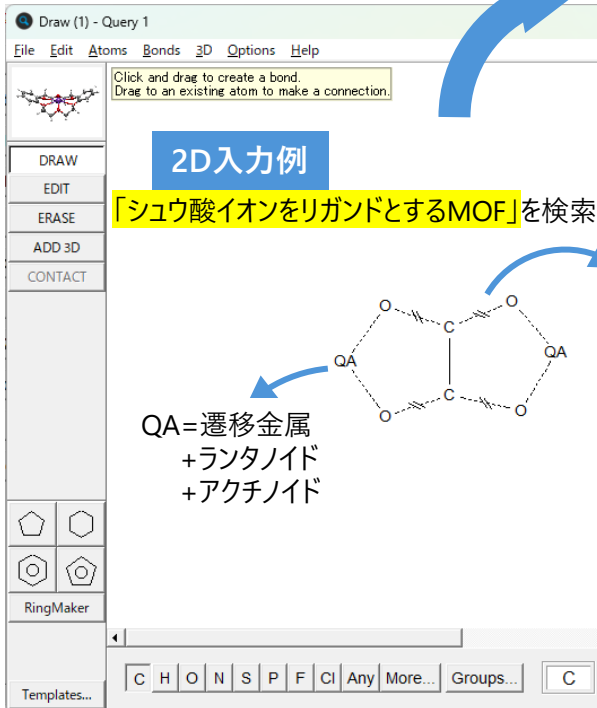


# CSD-Frameworksのワークフロー例



# 検索ツールConQuestを用いた検索例

5



Restrict Search

検索開始時、検索範囲の限定が可能

Current Restrictions

Type: Refcode List Title: unknown Percent: Unknown

Time: Thu Apr 3 04:18:21 2025

File: ...ets\CSD\_MOF\_subsets\3D\_MOF\_subset.gcd

Database CSD version 6.00 (Apr 2025)

32648 Refcodes

Entries not found

0 Refcodes

Restrict based on pre-defined hitlists

Choose a subset...

- Best representative lists
- CSD Drug subsets
- CSD MOF subsets
- ADPs available subset
- CSD Pesticide subset
- Electron diffraction subset
- GRAS subset
- High pressure subset
- Hydrate subset
- Minimal disorder subset
- Polymorphic subset
- Raw data subset
- Retracted subset
- Semiconductor subset
- Significant disorder subset
- Teaching subset

1D MOF subset

2D MOF subset

3D MOF subset

MOF subset

Non-disordered MOF subset

CSD Version... Select to restrict based on CSD version

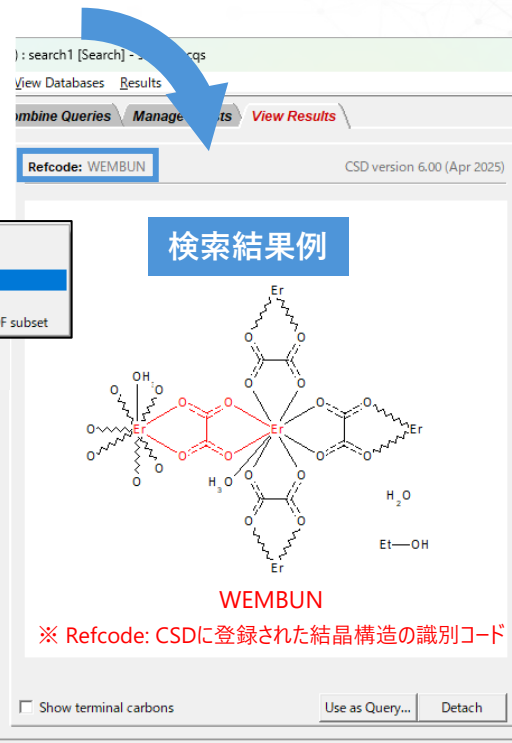
Contacts:

Options... Delete

Search

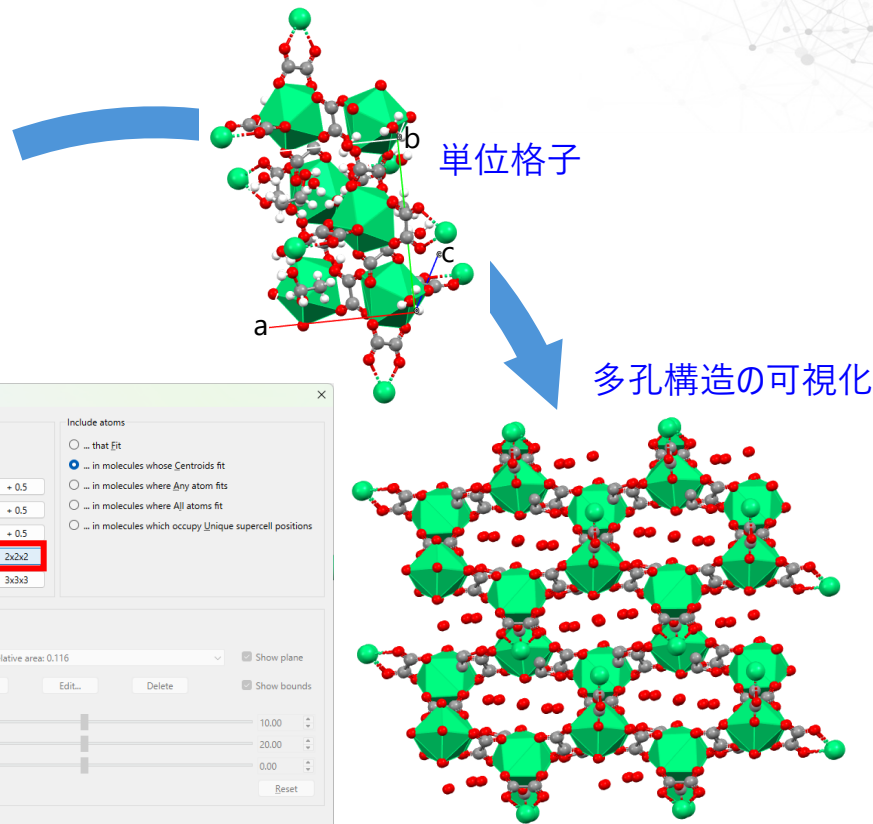
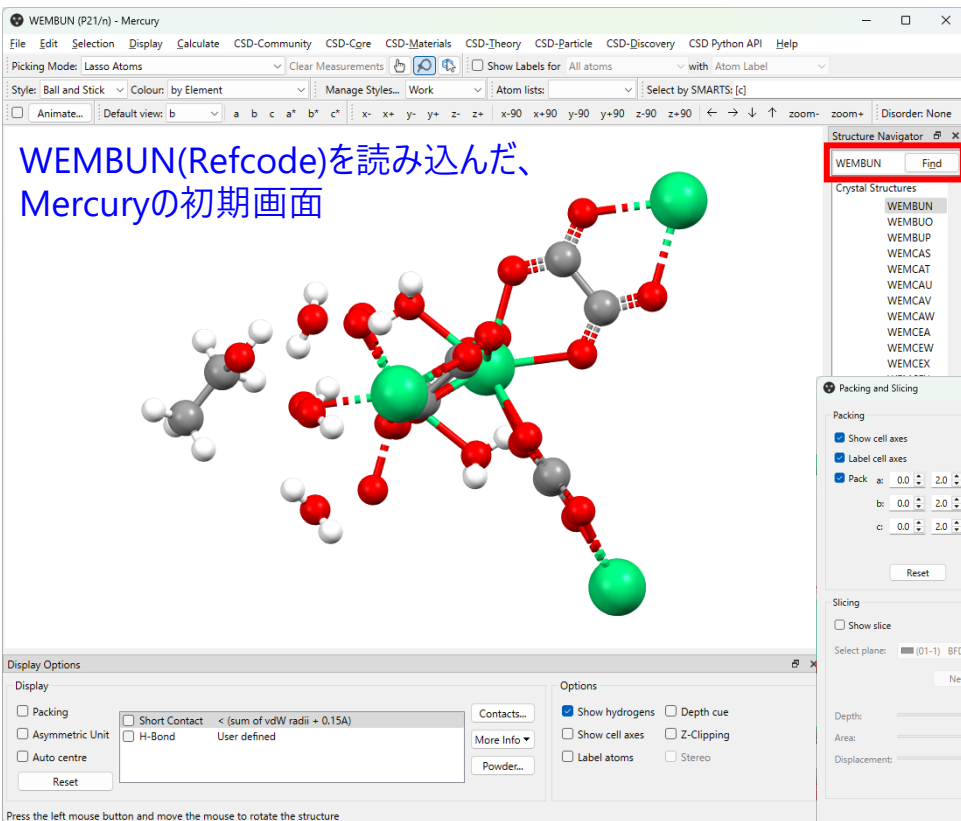
Store

Cancel



# MercuryによるMOF構造の可視化

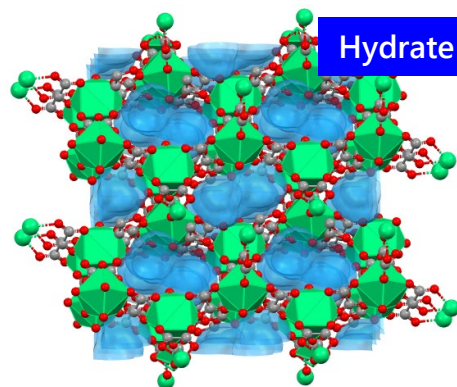
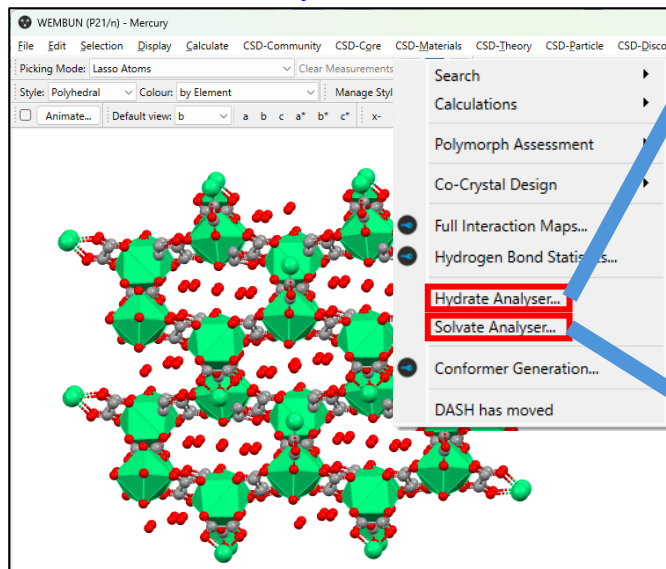
6



# Hydrate Analyser / Solvate Analyserによる解析例 7

目的：ゲスト分子(結晶溶媒)の多孔内での  
充填の様子を知る。

- 2つのAnalyserを続けて使用した例



多孔内で、結晶水(青)および結晶溶媒  
(赤)によって占められる空間を可視化。

The screenshot shows the 'Hydrate Analyser' results window. It contains a table of hydrogen bond data and a section for water motifs.

| Atom1 | Atom2 | Length | Length-Vol | Symm. op. 1   | Symm. op. 2   |
|-------|-------|--------|------------|---------------|---------------|
| O08   | H01A  | 2.365  | -0.335     | 1-x,y,z       | 1/2-x,y,1/2+z |
| O04   | H01A  | 2.365  | -0.335     | 1/2-x,y,1/2+z | -x,y,z        |
| O05   | H01A  | 2.365  | -0.335     | x,y,z         | 1/2-x,y,1/2+z |
| O03   | H02B  | 2.195  | -0.505     | x,y,z         | x,y,z         |
| O02   | H02A  | 2.194  | -0.154     | 1/2-x,y,1/2+z | x,y,z         |
| O02   | H02A  | 2.194  | -0.154     | x,y,z         | 1/2-x,y,1/2+z |
| O12   | H02A  | 2.194  | -0.154     | 1-x,y,z       | 1/2-x,y,1/2+z |
| O03A  | H02B  | 2.195  | -0.505     | 1/2-x,y,1/2+z | 1/2-x,y,1/2+z |
| OW1   | H02A  | 2.228  | -0.464     | x,y,z         | x,y,z         |
| H01B  | OW1   | 2.421  | -0.279     | x,y,z         | 1-x,y,z       |
| H09   | OW1   | 2.271  | -0.429     | x,y,z         | x,y,z         |
| H08A  | OW1   | 2.271  | -0.429     | 1/2-x,y,1/2+z | 1/2-x,y,1/2+z |
| H02C  | OW1   | 2.082  | -0.618     | x,y,z         | -x,y,z        |
| H04C  | OW1   | 2.082  | -0.618     | 1/2-x,y,1/2+z | 1/2-x,y,1/2+z |

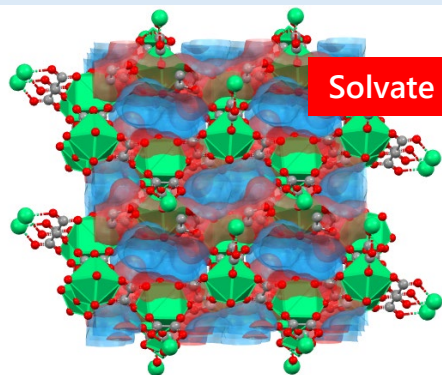
Water motifs

| Motif # | Hits | Water labels |
|---------|------|--------------|
| two_dd  | 2    | OW2          |
| three_a | 1    | OW3          |
| nine_d  |      |              |

Water volume 235.73

解析結果

- 結晶水が占める体積と比率
- 水素結合の情報
- 水素結合モチーフの分類



The screenshot shows the 'Solvate Analyser' results window. It contains a table of solvent volume and a section for hydrogen bond data.

| Solvent | Volume (%) | Volume (Å³) |
|---------|------------|-------------|
| 1       | 23.7       | 316.40      |

Results

| Volume | % of unit cell volume |
|--------|-----------------------|
| 23.7   | 316.40 Å³             |

解析結果

- 結晶溶媒が占める体積と比率
- 水素結合の情報





# Pore Analyserによる解析例

8

前処理：結晶水 / 溶媒の除去

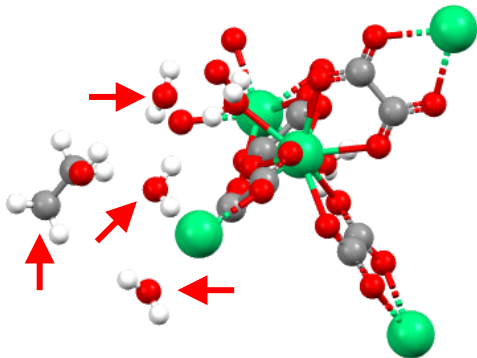


空隙の表示

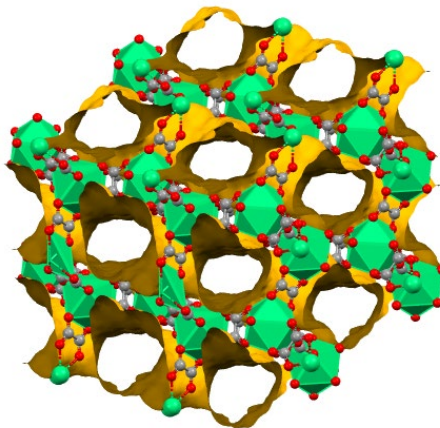
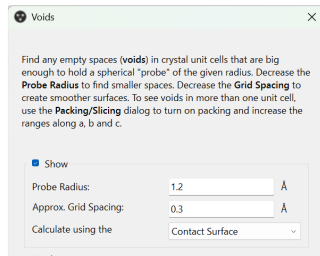


Pore Analyserによる解析

WEMBUNの初期構造から、水や溶媒4分子を除去する。



2×2×2セルの充填構造を作成し、空隙を表示。



細孔の体積、面積、形状などに関する計算値が得られる。

| Parameter                                    | Result   | Unit                            |
|----------------------------------------------|----------|---------------------------------|
| 1 System Volume                              | 1335.204 | Å <sup>3</sup>                  |
| 2 System Mass                                | 1449.280 | g/mol                           |
| 3 System Density                             | 1.802    | g/cm <sup>3</sup>               |
| 4 Total surface area                         | 42.76    | Å <sup>2</sup>                  |
| 5 Total surface area per volume              | 320.26   | m <sup>2</sup> /cm <sup>3</sup> |
| 6 Total surface area per mass                | 177.69   | m <sup>2</sup> /g               |
| 7 Network-accessible surface area            | 42.76    | Å <sup>2</sup>                  |
| 8 Network-accessible surface area per volume | 320.26   | m <sup>2</sup> /cm <sup>3</sup> |
| 9 Network-accessible surface area per mass   | 177.69   | m <sup>2</sup> /g               |
| 10 Total helium volume                       | 531.192  | Å <sup>3</sup>                  |
| 11 Total helium volume                       | 0.221    | cm <sup>3</sup> /g              |
| 12 Total geometric volume                    | 716.840  | Å <sup>3</sup>                  |
| 13 Total geometric volume                    | 0.298    | cm <sup>3</sup> /g              |
| 14 Network-accessible helium volume          | 531.192  | Å <sup>3</sup>                  |
| 15 Network-accessible helium volume          | 0.221    | cm <sup>3</sup> /g              |
| 16 Network-accessible geometric volume       | 716.408  | Å <sup>3</sup>                  |
| 17 Network-accessible geometric volume       | 0.298    | cm <sup>3</sup> /g              |
| 18 Pore limiting diameter                    | 3.87     | Å                               |
| 19 Maximum pore diameter                     | 4.38     | Å                               |
| 20 Number of percolated dimensions           | 1        | Dimension                       |



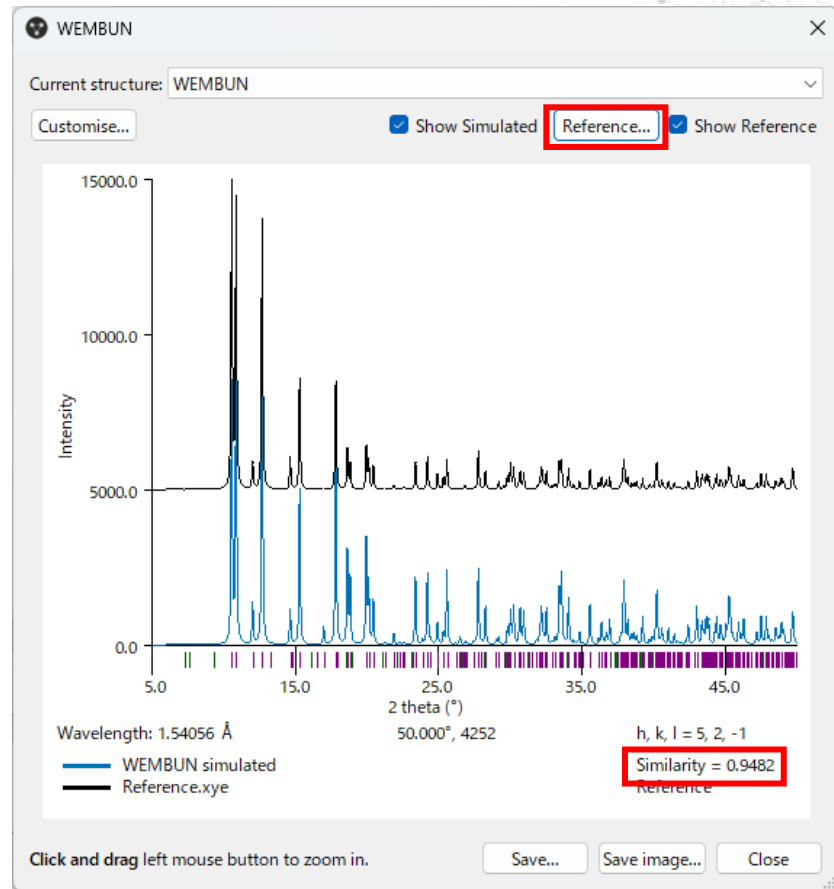
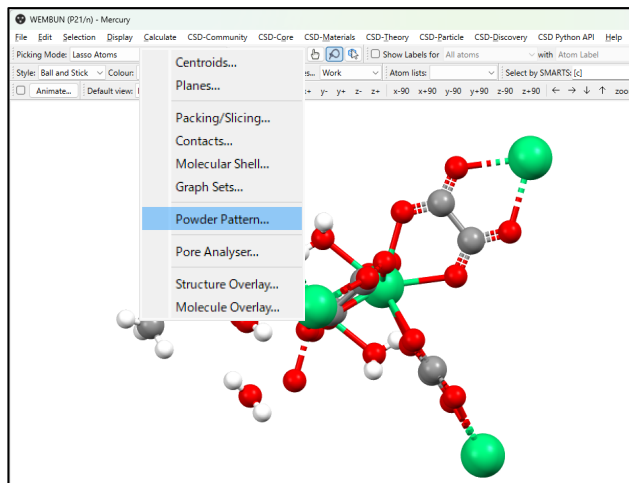


# PXRD Simulation

9

Calculateメニュー>Powder Pattern... をクリックするだけ。

- CSDデータに加え、独自の結晶のシミュレーションにも対応。
- 様々なファイル形式で、exportが可能 (.xy, xye, hkl, tsv, rawなど)。
- 画面右上のReference...から実験回折データを読み込むことで、シミュレーションデータとの直接的な比較ができ、さらに画面右下で、Similarity scoreによる類似性評価が表示される(右図)。



ご不明な点やご要望などございましたらお気軽にお問い合わせください。

CSD-Frameworks のトライアルも随時受け付けております。

連絡先：化学情報協会 科学データ情報室 email: [crystal@jaici.or.jp](mailto:crystal@jaici.or.jp)