

ICSD Desktop / ICSD Web 基本ガイド

(Ver. 3.1, September 2024)

ICSD Web の画面を使用。画面や機能は 2024 年 8 月現在。

目次

1. ICSD Desktop を起動する / ICSD Web へログインする	2
2. “Basic search & retrieve”で検索を行う	2
3. 検索結果を見る	4
3-1. 検索結果をソートする	4
3-2. 検索結果の詳細データを閲覧・出力する	4
4. “Advanced search & retrieve”で詳しく検索する	7
5. “Query History”から過去の検索条件や結果を呼び出す	7
6. “Query Management”で検索の掛合せ(AND, OR, NOT)を行う	8
複数の検索を行った後、それらの検索条件の掛合せで検索ができます。	8
7. “Personalize Account”で個人アカウントを登録する (ICSD Web で IP アドレス認証の場合のみ)	10

* 注意 *

ローカルインストールの ICSD Desktop と web サーバー使用の ICSD Web はほぼ同じインターフェイスを使用しているため、この基本ガイドは、ICSD Desktop と ICSD Web 共通のマニュアルです。ICSD Desktop, ICSD Web の使用中は、ブラウザの”戻る”を使用しないでください。設定した検索条件が消える可能性があります。3.で説明するように、”Back to Query”などで前のページに戻ってください。

ご質問や問題点はご契約窓口の方を經由して下記までご連絡ください。

基本ガイドの PDF 版をご希望の方もご連絡ください。

化学情報協会・科学データ情報室
〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル
TEL : 03-5978-3622
FAX : 03-5978-3600
E-mail : crystal@jaici.or.jp
HP : <https://www.jaici.or.jp/>

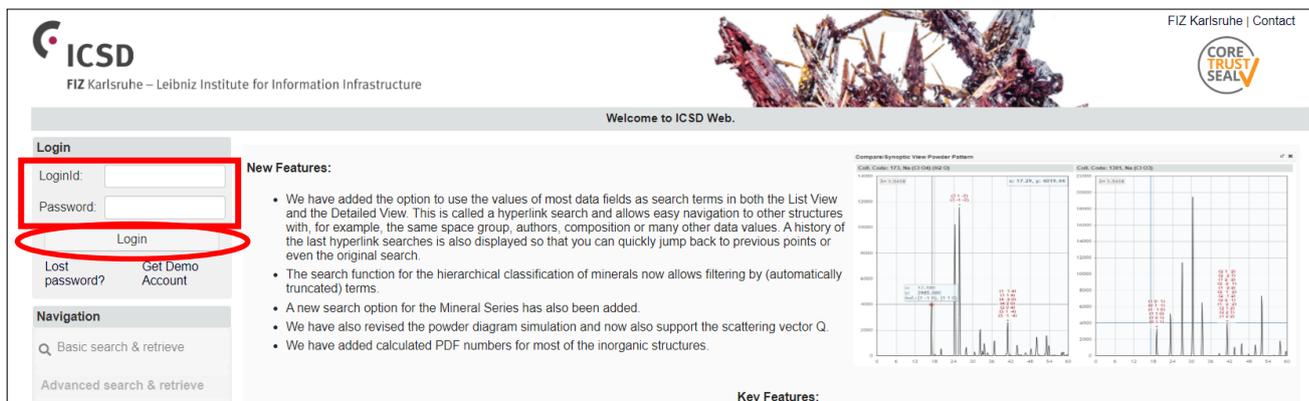
1. ICSD Desktop を起動する / ICSD Web へログインする

(1) ICSD Desktop を起動する

デスクトップ上のショートカット  や、Windows ボタン→すべてのプログラム→ICSD-Desktop→ICSD-Desktop をクリックすると、ブラウザに検索画面が立ち上がります。

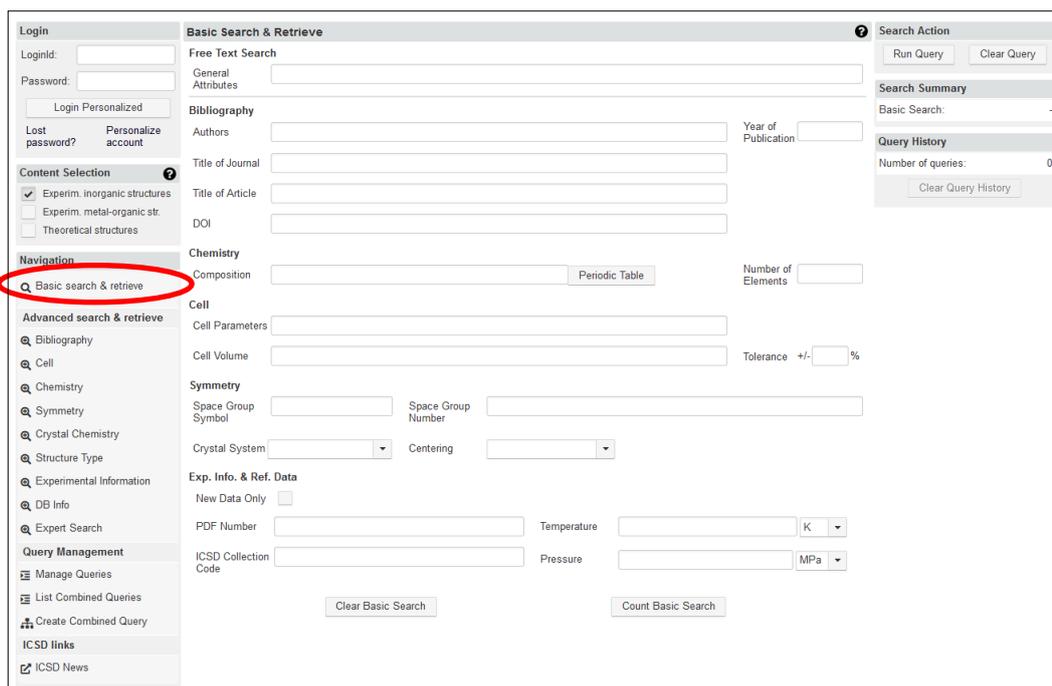
(2) ICSD Web へログインする

ICSD Web のページ (<https://icsd.fiz-karlsruhe.de>) へアクセスします。IP アドレスを登録している場合、自動認証され、ICSD Web へログインします。ID/Password でログインする場合は、ログイン ID とパスワードを、それぞれ”LoginId”と”Password”に記入し、”Login”をクリックします。



2. “Basic search & retrieve”で検索を行う

検索方法には”Basic search & retrieve”と”Advanced search & retrieve”の二種類がありますが、ここでは、”Basic search & retrieve”について説明します。左側の”Basic search & retrieve”をクリックしてください。（もう一方の”Advanced search & retrieve”については 4. を参照してください。）



3. 検索結果を見る

検索結果の見方や出力方法について説明します。

3-1. 検索結果をソートする

検索結果の表の上にある表示項目名をクリックすると、それぞれの項目で検索結果がソートできます。

検索条件の設定画面に戻りたい時はクリック。

検索結果の表示項目(青い四角)の追加・削除のカスタマイズが可能。

検索後に実験条件などによるフィルターをかけたい時に利用。

単語や数値上にカーソルを持っていき、「+」が表示された虫眼鏡マークが出た場合、クリックすると、その単語や数値で再検索される。

検索結果の1ページの表示件数を10件から50件まで増やすことが可能。

Coll. Code	HMS	Struct. Form	Struct. Type	Title	Authors	Reference	Cell Param	Standardise	Cell Volume	ANX-Formula	AB-Formula	Publication
24171	C 1 2/m 1	Li1.333 (Ni0.1	Li2MnO3	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	4.9540(2) 8.5	4.9540 8.573	201.87	AB2X3	AB2C3D6	2019
24180	R -3 m H	Li1.154 (Ni0.0	α-NaFeO2	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	2.8599(1) 2.8	2.8599 2.859	101.04	ABX2	ABC2	2019
24268	F d -3 m Z	Li0.425 (Ni0.0	Spinel#MgAl2	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	8.1576(3) 8.1	8.1576 8.157	542.86	AB2X4	A7.9B16C32	2019
24301	C 1 2/m 1	Li1.245 (Ni0.0	Li2MnO3	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	4.9608(4) 8.5	4.9608 8.565	201.93	A4B7X12	AB4C6D12	2019
24302	R -3 m H	Li0.999 (Ni0.0	α-NaFeO2	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	2.8596(1) 2.8	2.8596 2.859	100.95	ABX2	ABC2	2019
35810	P 63/m m c	Na0.67 Mn0.0	NaxCoO2	Pinning effect	Chu, Shiyong	Angewandte	2.8426(6) 2.8	2.8426 2.842	78.60	AB2X4	A0.5B0.9C2D	2021
35811	P 63/m m c	Na0.67 Mn0.0	NaxCoO2	Pinning effect	Chu, Shiyong	Angewandte	2.8681(1) 2.8	2.8681 2.868	79.90	AB2X4	A0.5BC1.9D4	2021
36756	R -3 m H	Li0.984 Ni0.7	α-NaFeO2	Understandin	Park, Sanghy	Journal of Alk	2.8675(2) 2.8	2.8675 2.867	101.26	ABX2	ABC2	2020
135004	P n m a	La2 Nd2 (Ti C	Perovskite#G	Phase stabilit	Cedervall, Jol	Journal of Sol	5.50082(12) :	5.5008 7.741	233.13	ABX3	ABC3	2021
32230	F d -3 m S	Co0.7 Mn0.3	Spinel#MgAl2	Magnetostrict	Keswani, Bha	Journal of Ap	8.3894 8.389	8.3894 8.389	590.46	A3X4	AB2C4	2019

3-2. 検索結果の詳細データを閲覧・出力する

確認したいレコードに、チェックマークを入れます(☑). 1つ選択すると、表の上にある"Show Detailed View"や"Export Data"などを選べるようになります。2つ以上選択すると、"Compare Structures"や"Compare Powder Pattern"で三次元構造や粉末回折パターンの比較が可能になります。

左側をクリック：検索結果全てのレコードを選択することが可能。

右側をクリック：表示されているページの全レコードを選択することが可能。

1つのレコードを閲覧する場合、Collection Codeのクリックでも閲覧可能。

別のページへ移動しても、チェックマークを入れたものは記憶されています。

Coll. Code	HMS	Struct. Form	Struct. Type	Title	Authors	Reference	Cell Param	Standardise	Cell Volume	ANX-Formula	AB-Formula	Publication
24171	C 1 2/m 1	Li1.333 (Ni0.1	Li2MnO3	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	4.9540(2) 8.5	4.9540 8.573	201.87	AB2X3	AB2C3D6	2019
24180	R -3 m H	Li1.154 (Ni0.0	α-NaFeO2	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	2.8599(1) 2.8	2.8599 2.859	101.04	ABX2	ABC2	2019
24268	F d -3 m Z	Li0.425 (Ni0.0	Spinel#MgAl2	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	8.1576(3) 8.1	8.1576 8.157	542.86	AB2X4	A7.9B16C32	2019
24301	C 1 2/m 1	Li1.245 (Ni0.0	Li2MnO3	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	4.9608(4) 8.5	4.9608 8.565	201.93	A4B7X12	AB4C6D12	2019
24302	R -3 m H	Li0.999 (Ni0.0	α-NaFeO2	Li/Fe substit	Billaud, Juliett	Journal of Ma	2.8596(1) 2.8	2.8596 2.859	100.95	ABX2	ABC2	2019
35810	P 63/m m c	Na0.67 Mn0.0	NaxCoO2	Pinning effect	Chu, Shiyong	Angewandte	2.8426(6) 2.8	2.8426 2.842	78.60	AB2X4	A0.5B0.9C2D	2021
35811	P 63/m m c	Na0.67 Mn0.0	NaxCoO2	Pinning effect	Chu, Shiyong	Angewandte	2.8681(1) 2.8	2.8681 2.868	79.90	AB2X4	A0.5BC1.9D4	2021
36756	R -3 m H	Li0.984 Ni0.7	α-NaFeO2	Understandin	Park, Sanghy	Journal of Alk	2.8675(2) 2.8	2.8675 2.867	101.26	ABX2	ABC2	2020
135004	P n m a	La2 Nd2 (Ti C	Perovskite#G	Phase stabilit	Cedervall, Jol	Journal of Sol	5.50082(12) :	5.5008 7.741	233.13	ABX3	ABC3	2021
32230	F d -3 m S	Co0.7 Mn0.3	Spinel#MgAl2	Magnetostrict	Keswani, Bha	Journal of Ap	8.3894 8.389	8.3894 8.389	590.46	A3X4	AB2C4	2019

(1) **Show Detailed View** : 選択したレコードの詳細データが表示されます。

選択したレコードについて、構造データの詳細が表示されます。左上の"Back to Query"をクリックすると検索条件の設定画面へ、"Back to List"で検索結果画面へ戻ります。

(2) **Compare Structures** と **Compare Powder Pattern** : 三次元構造と粉末回折パターンを比較できます。

選択した複数のレコードの三次元構造や粉末回折パターンを、一度に6個まで同時に表示できます。

(3) **Export Data と Report** : 選択したレコードを CIF, CSV, TXT file で出力します。

検索後, 選択したレコードを出力・保存するには, "Export Data"をクリックします。"Export Data"をクリックし, ファイル名の記入や出力形式の選択をしてください。"Export Single Cif"の場合, 選択した複数のレコードをひとつの CIF file として出力します。"Export Multiple Cif"の場合, 選択した複数のレコードを個別の CIF file で出力します。"Export Multiple Cif"で出力する場合, 複数の CIF file が1個の zip ファイルに入って出力されます。

年間のダウンロード残数を確認可能。

3-3. 個別に CIF 形式で出力する

3-2.(3)では, チェックマークで選択したレコードを一括して出力する方法を説明しました。検索結果の一覧画面でダウンロードマーク  をクリックすると, チェックマークの有無に関わらず, そのレコードの CIF file を個別に出力できます。

また, レコード閲覧画面の"Export Cif"をクリックすると, 閲覧中のレコードの CIF file を出力可能です。

【注意】 1セッション中の CIF file のダウンロード上限は 1000 件です。また, 契約内容により違いがありますが, 年間のダウンロード数には上限があります(5 千件~2 万件)。上限以上の大量の CIF file のダウンロードを希望される場合は, API のオプション契約をご検討ください。

4. “Advanced search & retrieve”で詳しく検索する

“Advanced search & retrieve”では，“Basic search & retrieve”より詳細な検索ができます。“Advanced search & retrieve”には9画面あり、必要な検索条件を設定して，“Run Query”をクリックします。

なお，“Basic search & retrieve”から“Advanced search & retrieve”へ直接移動すると，“Basic search & retrieve”で設定した条件がそのまま引き継がれます。“Basic search & retrieve”での検索条件をリセットするには、右上の“Clear Query”をクリックしてください。“Advanced search & retrieve”の9ページ中で何ページかに渡り検索条件を記入した場合、AND 検索で検索されます。

① 設定したい検索項目をクリックして詳細な検索条件を入力。

② 検索条件の入力は、手入力または選択肢から選択(2.を参照)。

③ 追加で設定したい検索条件がある場合は、対応する項目をクリックし、同様に検索条件を入力。

④ 全ての条件を入力したら，“Run Query”をクリックして検索開始。

5. “Query History”から過去の検索条件や結果を呼び出す

検索履歴は最大30件保存されます。右側のQuery Historyに検索日時と検索結果件数が表示されます。検索日時をクリックすると検索条件の設定画面が表示され、同じ条件での再検索や、条件を再設定ができます。ICSD Webにおいては、LoginId/Password 認証でログインした場合と、IP アドレス認証後に個人用アカウントでログインした場合(7.を参照してください)では、ログアウトしても過去の検索履歴が残ります。ICSD-Desktopではログインの必要なく、検索履歴が残ります。

クリックすると検索結果が表示。

クリックすると検索条件が表示。

Search Date	Number of queries
2024-08-30T08:49	122
2024-08-30T08:47	9470
2024-08-30T08:44	712
2024-08-30T08:09	273

6. “Query Management”で検索の掛合せ(AND, OR, NOT)を行う

複数の検索を行った後、それらの検索条件の掛合せで検索ができます。

6-1. “Manage Query”で Query の整理を行う

まず, “Manage Queries”をクリックします。

The screenshot shows the ICSD search interface. On the left sidebar, under the 'Query Management' section, the 'Manage Queries' option is highlighted with a red box. The main area shows search filters and a 'Search Action' panel with 'Run Query' and 'Clear Query' buttons.

検索履歴が表示されます。🔍 をクリックすると、各 Query の検索条件等を閲覧できます。

	Query Name	Date	Query Type	# of hits	Saved
<input type="checkbox"/> 🔍	2024-08-30T08:57	2024-08-30T08:57	Basic	1092	
<input type="checkbox"/> 🔍	2024-08-30T08:49	2024-08-30T08:49	Basic	122	
<input type="checkbox"/> 🔍	2024-08-30T08:47	2024-08-30T08:47	Basic	9470	
<input type="checkbox"/> 🔍	2024-08-30T08:44	2024-08-30T08:44	Basic	712	
<input type="checkbox"/> 🔍	2024-08-30T08:09	2024-08-30T08:09	Basic	273	

各 Query の Query Name の変更や Comment の付与が可能です。記入が終わったら、チェックボックスにチェックを入れ, “Save selected queries”をクリックして保存します

The screenshot shows the 'Manage Queries' interface with a query selected for editing. A red box highlights the 'Save selected queries' button at the bottom. Callouts provide instructions: ① Query Name と Comment を変更または記入. Query Name に検索の特徴を記入しておくとうわかりやすい. ② 変更を保存したい Query にチェック. ③ クリックすると保存完了.

Query Name	Date	Query Type	# of hits	Saved
2024-08-30T08:57	2024-08-30T08:57	Basic	1092	
2024-08-30T08:49	2024-08-30T08:49	Basic	122	
2024-08-30T08:47	2024-08-30T08:47	Basic	9470	
2024-08-30T08:44	2024-08-30T08:44	Basic	712	
2024-08-30T08:09	2024-08-30T08:09	Basic	273	

6-2. “Create Combined Query”で掛合せを決定する まず, “Create Combined Query”をクリックします.

The screenshot shows the 'Manage Queries' interface. On the left sidebar, under 'Query Management', the 'Create Combined Query' option is highlighted with a red box. The main area displays a table of existing queries:

Query Name	Date	Query Type	# of hits	Saved
<input type="checkbox"/> Cubic 2000	2024-08-30T08:57	Basic	1092	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Mn O	2024-08-30T08:49	Basic	122	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> 2024.1	2024-08-30T08:47	Basic	9470	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Author search	2024-08-30T08:44	Basic	712	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Cr Mn Fe O	2024-08-30T08:09	Basic	273	<input checked="" type="checkbox"/>

掛け合わせたい検索を選択し, AND,OR,NOT のいずれかの **+** をクリックします. Name と Comment を記入しておく, 掛け合わせた検索に名前やコメントを付与することができます. “Run Query”をクリックして, 掛け合せ検索をします. 検索結果の閲覧やデータの出力は, **3.**を参照ください.

The screenshot shows the 'Create Combined Query' dialog box. The 'Name' field contains 'Cr Mn Fe O Cubic' and the 'Comment' field contains 'Year 2000'. The 'Available Queries' table shows the following items selected with checkboxes:

Query Name	Date	Query Type	# of hits	Saved
<input checked="" type="checkbox"/> Cubic 2000	2024-08-30T08:57	Basic	1092	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Mn O	2024-08-30T08:49	Basic	122	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> 2024.1	2024-08-30T08:47	Basic	9470	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Author search	2024-08-30T08:44	Basic	712	<input checked="" type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/> Cr Mn Fe O	2024-08-30T08:09	Basic	273	<input checked="" type="checkbox"/>

Below the table, the logical operators are shown:

- Must have (AND): + -
- Must have at least one of (OR): + -
- Must not have (NOT): + -

The 'Run query' button at the bottom right is highlighted with a red box.

7. “Personalize Account”で個人アカウントを登録する（ICSD Web で IP アドレス認証の場合のみ）

ICSD Web を IP アドレス認証で使用する場合に、個人用アカウントを登録してログインすると、一旦セッションが終了して再び利用しても、過去の検索履歴を参照できます(5.で説明した”Query History”に表示されます)。個人用アカウントを用いずに IP アドレス認証のみで検索した場合も検索履歴は一時的に保存されますが、セッションが終了すると検索履歴は消去されます。(LoginId/Password 認証の方は、個人アカウントの登録をしなくても、ログイン後も検索履歴が残ります。)

登録は”Personalize account”ボタンから行ってください。作成した個人アカウントでログインする場合、1.で説明した通り ICSD Web に IP アドレス認証により自動ログインした後、”LoginId”と”Password”を入力し、”Login Personalized”をクリックします。ログイン後の操作方法はこれまでの説明通りです。

登録したアカウントでのログインはこちらから。

登録はこちらから。

必要事項を記入して
”Setup Personalized Account”を
クリック。

以上