

無機結晶構造データベースICSD

初心者向け講習会

化学情報協会

2026/6 作成

JAIC

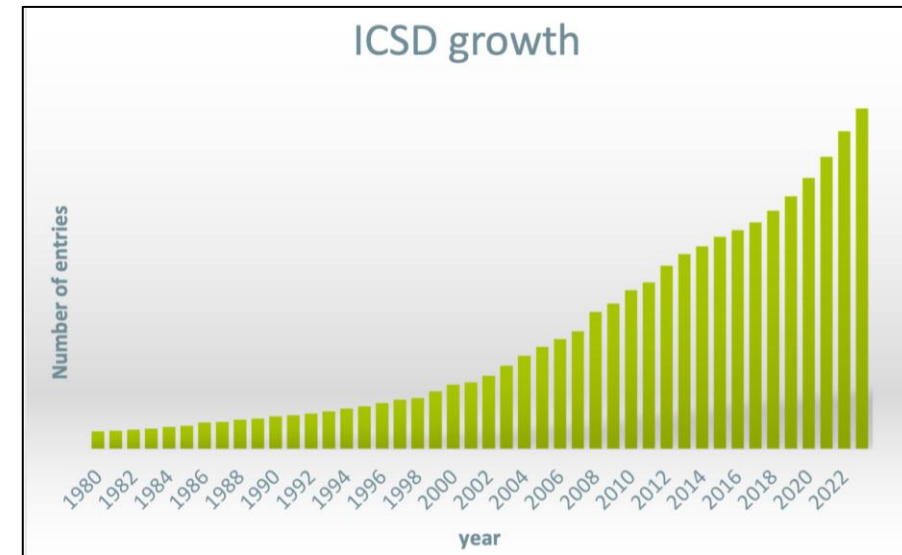
化学情報協会

本日の内容

1. ICSDの収録内容のご説明(10分)
2. ICSDのデモ(45分)
3. 質問タイム(5分)

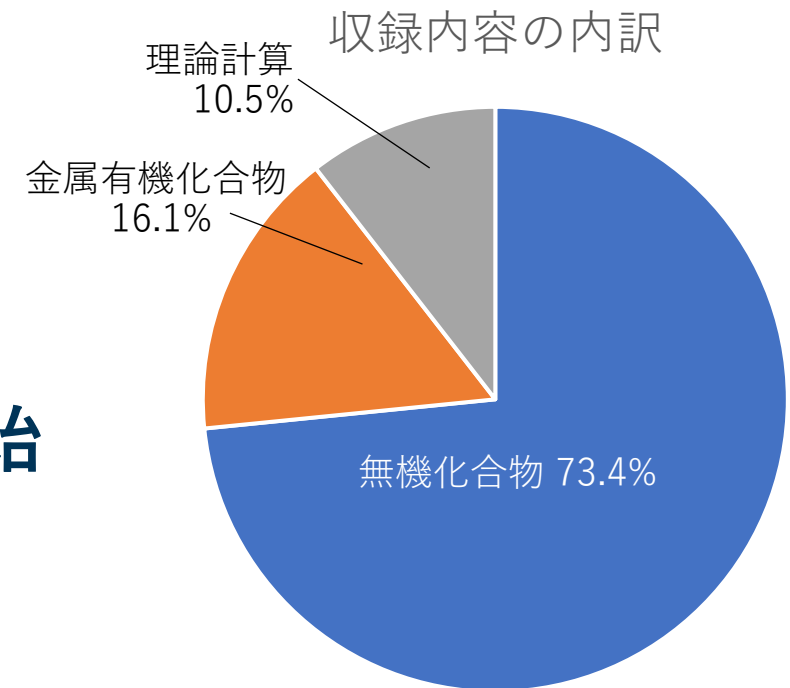
ICSDの概要

- **Inorganic Crystal Structure Database**
和名：無機結晶構造データベース
- 製作元：FIZ Karlsruhe(独)
1978年にBonn大学(独) Prof. Günter Bergerhoffが構想し、スタート。
その後、複数の機関がデータベース作成に協力し、現在に至る。
- 収録内容：化合物情報、結晶学データ、実験情報、書誌情報
- データ収録数：33.5万件
- データ更新：年2回、約1.5万件/年 増加
- 利用形態：ICSD Desktop・ICSD Web



収録化合物

- 最初の収録基準
 - C—C結合とC—H結合を含まず、
 - 原子座標が完全に決定されたか、対応する構造タイプから原子座標が計算されたもの
- 2003年：金属と金属間化合物を収録開始
- 2016年：理論計算によって得られた一部の構造を収録開始
- 2018年：無機材料と類似の性質を持つ一部の金属有機化合物を収録開始



3次元で完全に描写できる構造のみが対象
変調構造、ポリタイプ、準結晶、
薄膜層からの構造は含まない。

収録対象：理論計算による構造とは

一定の選択基準を満たす構造のみを、専門家監修で収録。

- ・ 査読付きジャーナルに掲載
- ・ 構造の $E(\text{tot})$ が低い (平衡構造に近い)
- ・ 比較可能な実験結果に最も近いデータを提供する方法を選択

計算に関する情報が収録。

- ・ コード、検索アルゴリズム (存在する場合)
- ・ Method/ Functional ・ 基底関数系
- ・ 計算の詳細 (カットオフエネルギー、k 点メッシュなど) 等

Content Selection

?

- Experm. inorganic structures
- Experm. metal-organic str.
- Theoretical structures

Theoretical Information

Temperature	room temperature	Pressure	12000 [MPa]
Calculation method	Ab initio optimization	Calculation method	Plane waves method
Calculation method	Density functional theory		
Remarks	Optimized existing crystal structure		

収録対象：金属有機化合物とは

近年、無機構造と有機構造の区別が曖昧に。

(ゼオライト、触媒、バッテリー、ガス貯蔵システムなど)

収録基準：

- ・ 少なくとも 3 つの金属/半金属が含まれている

(酸素、硫黄、窒素により無機部分が有機部分より比較的大きい場合、2つの金属を含む有機金属構造も含む)

- ・ 研究の焦点が、金属または非 C 元素の特性にある場合。
- ・ 材料特性が無機用途である。

(バイオテクノロジー、医療、製薬向け材料は含まない)

用途と材料特性のキーワードでの検索機能が可能。

Content Selection

- Experim. inorganic structures
- Experim. metal-organic str.
- Theoretical structures

Keywords

CIE chromaticity coordinates, Coordination polymers (CPs), Electronic excitation/emission spectra, Elemental analysis (ICP-OES), FT-IR, Gas absorption, Metal-organic frameworks (MOF), Photoluminescence (PL), Thermogravimetry (TGA,TG).

より詳細を知りたい場合はこちら：<https://icsd.products.fiz-karlsruhe.de/en/about/about-icsd#experimental+metal-organic+structures>

本日の内容

1. ICSDの収録内容のご説明(10分)

2. ICSDのデモ(45分)

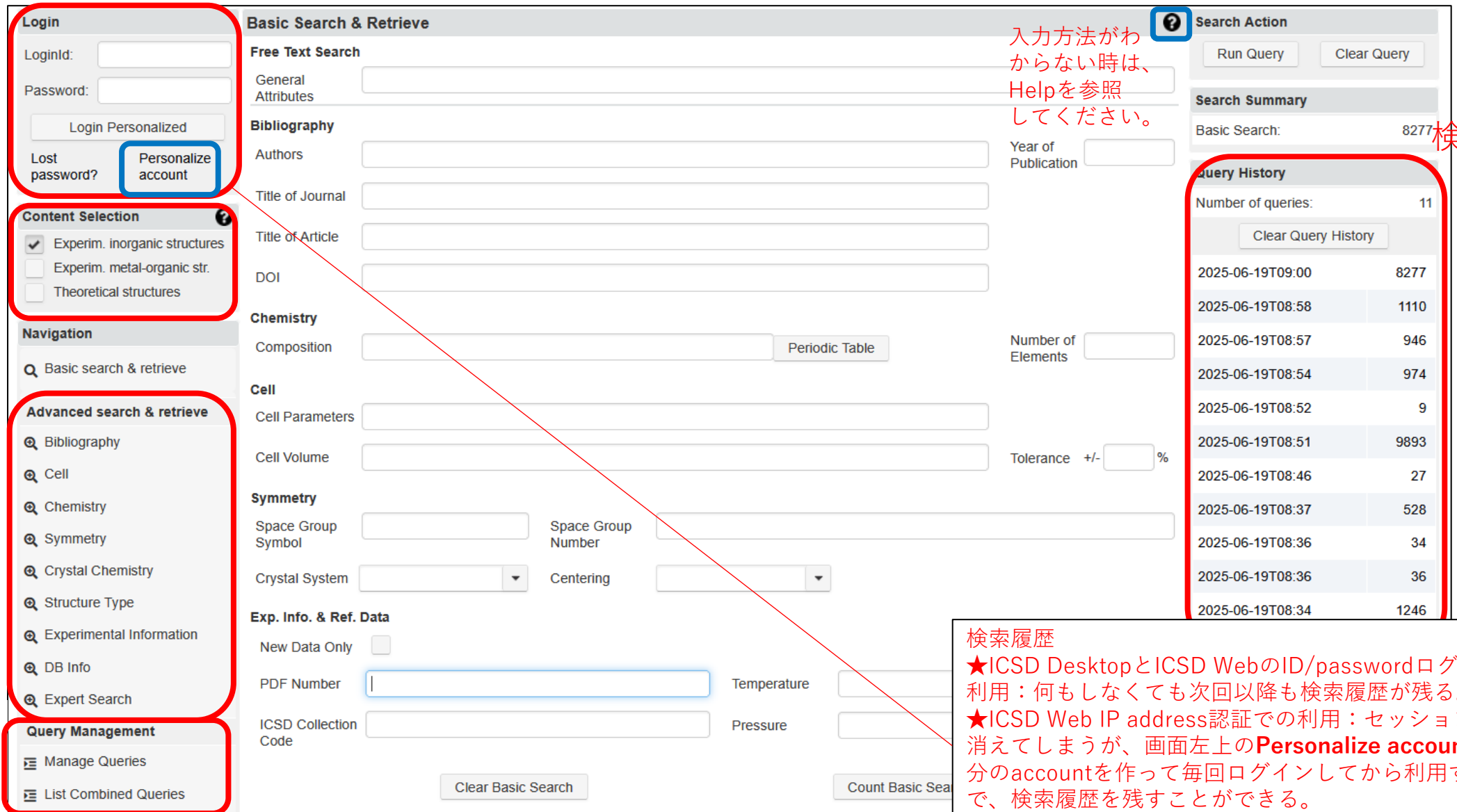
ここからはICSDの画面でご説明していきます。

3. 質問タイム(5分)

ここまでで
ご質問があれば、
お気軽にご質問ください。

- 以降のスライドは、本日紹介したICSDの検索方法です。

Basic Search & Retrieve画面



Login

LoginId:
 Password:

Content Selection

Experm. inorganic structures
 Experm. metal-organic str.
 Theoretical structures

Navigation

Basic search & retrieve

Advanced search & retrieve

Bibliography
 Cell
 Chemistry
 Symmetry
 Crystal Chemistry
 Structure Type
 Experimental Information
 DB Info
 Expert Search

Query Management

Manage Queries
 List Combined Queries

Basic Search & Retrieve

Free Text Search

General Attributes
 Bibliography
 Authors
 Title of Journal
 Title of Article
 DOI
 Chemistry
 Composition 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 Temperature
 ICSD Collection Code Pressure

Search Action

Search Summary

Basic Search: 8277

Query History

Number of queries: 11

Query ID	Count
2025-06-19T09:00	8277
2025-06-19T08:58	1110
2025-06-19T08:57	946
2025-06-19T08:54	974
2025-06-19T08:52	9
2025-06-19T08:51	9893
2025-06-19T08:46	27
2025-06-19T08:37	528
2025-06-19T08:36	34
2025-06-19T08:36	36
2025-06-19T08:34	1246

入力方法がわからない時は、Helpを参照してください。

検索履歴

・無機化合物
 ・金属有機化合物
 ・理論計算
 の選択。

より詳細な検索をしたい場合は、Advanced searchへ。

検索を複数回実施した後、その検索自体の掛け合わせを行いたいとき。

検索履歴
 ★ICSD DesktopとICSD WebのID/passwordログインでの利用：何もしなくても次回以降も検索履歴が残る。
 ★ICSD Web IP address認証での利用：セッションごとに消えてしまうが、画面左上のPersonalize accountから自分のaccountを作って毎回ログインしてから利用することで、検索履歴を残すことができる。

Basic Search & Retrieve画面

数値検索フィールドでは、
範囲指定、カンマ区切りで複数個を並列、
>、<、>=、<=、*などが利用可能。
文字検索フィールドでも*が利用可能。

フリーテキストサーチ

論文情報で検索

化合物情報検索

格子定数検索

対称情報に関する検索

実験情報等からの検索

Basic Search & Retrieve

Free Text Search

General Attributes

Bibliography

Authors

Title of Journal

Title of Article

DOI

Year of Publication

Chemistry

Composition

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

Temperature

Pressure

Run Query

Clear Query

Search Summary

Basic Search: 8277

Query History

Number of queries: 11

Clear Query History

Search Action	Count
2025-06-19T09:00	8277
2025-06-19T08:58	1110
2025-06-19T08:52	9
2025-06-19T08:51	9893
2025-06-19T08:46	27
2025-06-19T08:37	528
2025-06-19T08:36	34
2025-06-19T08:36	36
2025-06-19T08:34	1246

Clear Basic Search

Count Basic Search

AND,NOT,OR検索が可能。
(Na K)と括弧でくくると、Na or Kの検索。
-NaとマイナスをつけるとNOT検索となる。

周期表から原子を選択可能。

格子定数書き方例：10 10 10 90 90 90
10 8-12 10 90 * 90 など

数値の許容範囲

化合物を構成する
原子数を指定可能。

画面内に複数の条件を書いた場合は、AND検索になる。
Basic SearchとAdvanced searchとをまたがるAND検索できない。

Periodic Tableでの指定例

MnOが入り、Feは入らない結晶。Mnは2+~4+で、Mn_{1~3}指定。
指定のない元素については、含んでも含まなくてもどちらもいいことになる。

Search Chemistry Visual Search mode

族や周期を選択することも可能。

金属、遷移金属、非金属と選択することも可能。 Click on element or select period and/or group.

Restrict total number of elements to selected number of elements

OK Cancel

選択した原子のみで構成される化合物を検索したいときにチェックを入れる。

Search Chemistry Visual Search mode

Number of Elements Units of Coefficients Moles

El.Symb.	Co.(min)	Co.(max)	Ox.(min)	Ox.(max)
Mn	1	3	2	4
Fe				
O				

AND NOT AND

Restrict total number of elements to selected number of elements

OK Cancel

化学量論数や酸化数の指定が可能。

NOTに変更可能。

Periodic Tableでの指定例

(Mn or Fe or Co) AND O の検索

Search Chemistry Visual Search mode

Number of Elements Units of Coefficients

OR検索したい場合、二つ目以降は手入力してください。

El.Symb.

AND

Restrict total number of elements to selected number of elements

OK Cancel

NaClの結晶で、Naの一部がKと置換した結晶を検索したい(Kは占有率0.2以下)。

Search Chemistry Visual Search mode

Number of Elements Units of Coefficients

El.Symb.

AND

AND

AND

Restrict total number of elements to selected number of elements

OK Cancel

Basic Search & Retrieve画面

Login

LoginId:

Password:

Lost password? Personalize account

Basic Search & Retrieve

Free Text Search

General Attributes

Search Action

Content Selection

Experm. inorganic structures

Experm. metal-organic str.

Theoretical structures

Navigation

Advanced search & retrieve

Query Management

Search Summary

Series:	11
	8277
	1110
	946
	974
	9
	9893
	27
	528
	34
	36
	1246

electronic_structure	bandstructure	oxi_states	dos	thermos	8277
provenance	magnetism	elasticity	adsorption	charge_density	1110
eos	dielectric	piezoelectric			946
					974
					9
					9893

Symmetry

Space Group Symbol Space Group Number

Crystal System Centering

Exp. Info. & Ref. Data

New Data Only

PDF Number Temperature K

ICSD Collection Code Pressure MPa

Materials Projectの特性情報の有無が検索可能に。下記のワードで検索すると、該当する化合物リストが取得可能。ただし、物性値での検索はできず、Materials Projectへのリンクから具体的な物性値を確認する仕様で、ICSD内には物性値の収録はなし。

Advanced search

Login

LoginId:

Password:

Content Selection ?

Experm. inorganic structures

Experm. metal-organic str.

Theoretical structures

Navigation

Advanced search & retrieve

-
-
-
-
-
-
-
-
-

Chemistry Search ?

Composition Number of Elements

Structural Formula Formula Weight

Number of Formula Units

Chemical Name

ANX Formula AB Formula

Mineral Name

Mineral Name (IMA)

Mineral Group

Mineral Series

Search Action

Search Summary

Bibliography: -

Cell: -

Chemistry: -

Symmetry: -

Crystal Chemistry: -

Structure Types: -

Experimental Info: -

DB Info: -

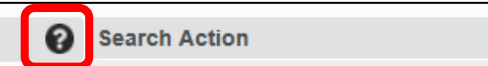
Expert: -

Query History

Number of queries: 0

Advanced search内に記入した条件は、画面をまたいでいても、全てAND検索となる。

Chemistry Search



Login

LoginId:

Password:

Login Personalized

Lost password? Personalize account

Content Selection

Experm. inorganic structures

Experm. metal-organic str.

Theoretical structures

Navigation

Basic search & retrieve

Advanced search & retrieve

Bibliography

Cell

Chemistry

Symmetry

Crystal Chemistry

Chemistry Search

Composition e.g. Na Cl

Structural Formula

Chemical Name

ANX Formula

Mineral Name

Mineral Name IMA

Mineral Group

Mineral Series

ANX Formula検索

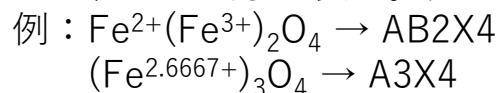
- ・カチオン：A～M
- ・中性の原子：N～R
- ・アニオン：X、Y、Z、S～W で表す。

* 基本的には水素は考慮しない。

* 同じサイトに占有する異なる原子タイプは、単一の原子タイプとする。基本的には、一番大きい占有率の原子を使う。もし、占有率が同じ場合は、最初の原子を使う。

* ここで例外としては、カチオンとアニオンが同じサイトを占有している場合には、一つの原子として扱わず、別のものとして扱う。

* 同じ原子が違うサイトに何か所もある場合は同一とする。ただし、酸化状態が別の場合には、別の文字で表す。例えば、Feの二価と三価は違う酸化状態なので違う文字で表す。



* 各原子タイプについて、多重度に占有率を掛け合わせ、その積を加算。合計は四捨五入され、最大公約数で割る。

* 四捨五入後の合計が0の場合、すべての合計に共通因数を掛け合わせ、最小の合計が1.0になるようにする。これにより、省略される要素はなくなる。

* アルファベットを最初に記載した順に並べ、数字は、それぞれのグループの中で段々大きくなるように並べる。



* ただし、ICSDでは、カチオン4つ、中性原子3つ、アニオン3つまでしか検索できない。

Chemical formula	ANX formula
$\text{Mg}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_4)_3$	A2B3C3X12
$\text{Ca}_3(\text{Al}_{1.3325}\text{Fe}_{0.6675})\text{Si}_3\text{O}_{12}$	A2B3C3X12
$(\text{Mg}_{2.7}\text{Fe}_{0.3})(\text{Al}_{1.7}\text{Cr}_{0.3})\text{Si}_3\text{O}_{12}$	A2B3C3X12

Chemistry Search

Login

LoginId:

Password:

Lost password? Personalize account

Content Selection

Experim. inorganic structures
 Experim. metal-organic str.
 Theoretical structures

Navigation

Experimental information
 DB Info
 Expert Search

Chemistry Search

Composition Number of Elements

e.g. Na Cl

Structural Formula Formula Weight

e.g. Pb (W O4)

Number of Formula Units

Chemical Name

ANX Formula **AB Formula**

e.g Adamite

e.g Halamishite

ixene

erroalluaudite

AB Formula検索

- * 基本的なルールは、ANX formulaと同じ。
- * ただし、ANX formulaと異なる点は、Hを考慮に入れること。
- * また、カチオン、アニオン、中性の原子などに割り当てられた文字はない。

Chemical formula

H₂O
K₂(S₂O₇)
Na₆O(SO₄)₂

AB formula

AB₂
A₂B₂C₇
A₂B₆C₉

Crystal Chemistry Search

Crystal Chemistry Search

Interatomic Distances

	Atom A	Ox. A		Atom B	Ox. B	d_{minAB}	d_{maxAB}
	<input type="text"/>	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
AND	<input type="text"/>	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
AND	<input type="text"/>	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
AND	<input type="text"/>	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Minimum Distances

Atom A	Atom B	d_{minAB}	d_{maxAB}
<input type="text"/>	- <input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Atom Coordination

Central Atom	Coord. Number	Coord. Atoms
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Crystal Structure is

Order/Disorder Structure

Mineral

Disordered Structure

Prototype Structure Type

Interatomic Distances検索

単位胞内の2原子間の距離を検索。
酸化数は、自動的に ± 0.1 で検索される。

Minimum Distances検索

指定の原子間の最小距離が、指定の範囲内にある化合物を検索。

Atom Coordination検索

中心の原子・配位数・配位する原子を指定して検索できる。
ただし、現在(ver. 2026.1)、ICSDのすべてのデータから網羅的に検索できないことに注意。Atom Coordination検索ができるのは、Experim. inorganic structuresのデータ24.5万件のうち、13万件のみ。

Structure Type Search

どのようなStructure typeが入っているのか確認したい場合は、*と入力すると、全structure typeが閲覧できます。(ver. 2026.1 では、22.6万件の収録データに、11,283種類のstructure typeが割り当てられています)

Login
LoginId:
Password:

Content Selection
 Experm. inorganic structures
 Experm. metal-organic str.
 Theoretical structures

Navigation

Structure Type Search
Pre Defined Structure Types
Structure Type e.g. *Mg2SiO4* or *
There are no Structure Type informations to display!
Please first enter a (suitable) search expression for the structure type in the
Structure Type Descriptors

 SpaceGrp Wyck

Structure Type Search
Pre Defined Structure Types
Structure Type *
e.g. *Mg2SiO4* or *Olivine* or *Mg2GeS4* or *S1(2)*

Structure Type ^	Alias ^	Prot. ^	Mem. ^	Sys. ^	Sp. Gr. ^	Wy
((C2)2O2Dy12)I18		421641	2	HE	P6/M	I11 k_
((C2H5)4N)4(SCN)8Pu		238915	4	TE	I4/MMM	n4 m3
((C3H7)4N)2Mn(H2O)4Re6S8(CN)6		91172	2	TE	I4/M	i5 h4 i
((C4H9)2NH2)26Cd12In48S97		281499	3	CU	I-43D	e12 d
((CH3)2H2N)6(SO4)2Co2(C2O4)3		162958	2	CU	P4132	e7 d c
((CH3)2NH2)2CoCl4		110562	6	MO	P121/N1	e23
((CH3)2NH2)2In2Sb2S7		185457	4	MO	C12/C1	f14 e
((CH3)2NH2)2MnBr4		240877	7	MO	14	e11
((CH3)2NH2)2MnBr4		240877	7	MO	P121/N1	e23
((CH3)2NH2)2TiCl6		281532	5	OR	PNNM	h g4 a
((CH3)2NH2)2TiCl6		281532	5	OR	PNNM	h3 g6
((CH3)2NH2)3Mo12SiO4OHO35		240978	2	TG	R-3MH	i6 h14
((CH3)2NH2)3Sb2Cl9		172431	2	MO	P1C1	a38
((CH3)2NH2)4(BiCl6)Cl		53593	7	OR	P21212	c9 b a
((CH3)2NH2)4(NdCl6)Cl		155692	5	OR	P22121	c21 b

(1 of 820)

There are 12296 lines with predefined Structure Type definitions for '*'. Double-click on an entry in the table above to transfer this type to the search field 'Structure Type'.

Structure Type Search

perovskite関連のstructure typeを検索する場合。なるべく広く検索したいなら、*を前後につける。

Structure Type Search

Pre Defined Structure Types
Structure Type

e.g. *Mg2SiO4* or *Olivine* or *Mg2GeS4* or *S1(2)*

Structure Type ^	Alias ^	Prot. ^	Mem. ^
((CH3)3NH)3(Mn2Br7)	anti-Perovsk	110262	9
(Ca,Li)(Zr,Ta)O3	Perovskite	78031	55
(CH3NH3)2KRuBr6	Double perov	133478	6
(CH3NH3)PbI3(Phase-I)	Perovskite, I	291372	20
(CH3NH3)PbI3(Phase-II)	Perovskite, I	241477	24
(CH3NH3)PbI3(Phase-III)	Perovskite, I	47544	14
(CH3NH3)PbI3(Phase-IV,V)	Perovskite, I	241481	12
(CH3NH3)PbI3-[I4cm]	Perovskite, I	250739	6
(La,Ca)FeO3	Perovskite	142837	4
(La,Ca)FeO3	Perovskite	142837	4
(Li,La)TiO3-[I]	Perovskite	91810	37
(Li,La)TiO3-[II]	defect-Perov	99395	19
(Nd,Ca)MnO3	Perovskite	82632	34
(Sr,Ln)CoO3-x	defect-Perov	240248	59
(Sr,Nb)8O11+x	Elpasolite-re	160442	6

(1 of 15) [1] [2] [3] [4] [5] [6] [7] [8] [9] [10]

There are 225 lines with predefined Structure Type definitions for "perovskite". Double-click on an entry in the table above to transfer this type to the search field 'Structure Type'.

Structure Type Search

Pre Defined Structure Types
Structure Type

e.g. *Mg2SiO4* or *Olivine* or *Mg2GeS4* or *S1(2)*

Structure Type ^	Alias ^	Prot. ^	Mem. ^	Sys. ^	Sp. Gr. ^	Wy
(Ca,Li)(Zr,Ta)O3	Perovskite	78031	55	OR	62	d c3 _
(CH3NH3)PbI3(Phase-I)	Perovskite, I	291372	20	OR	PNMA	d c3 b
(CH3NH3)PbI3(Phase-II)	Perovskite, I	241477	24	TE	I4/MCM	%l% t
(CH3NH3)PbI3(Phase-III)	Perovskite, I	47544	14	CU	PM-3M	_ d a
(CH3NH3)PbI3(Phase-IV,V)	Perovskite, I	241481	12	CU	IM-3	g e2 c
(CH3NH3)PbI3-[I4cm]	Perovskite, I	250739	6	TE	I4CM	c b2 a
(La,Ca)FeO3	Perovskite	142837	4	TC	P-1	i8 h f i
(La,Ca)FeO3	Perovskite	142837	4	TC	P1	a40
(Li,La)TiO3-[I]	Perovskite	91810	37	TG	167	e d b i
(Nd,Ca)MnO3	Perovskite	82632	34	MO	11	f% e4
(Sr,Pr)MnO3	Perovskite	86188	26	OR	FMMM	i% h g
Ba(Ce,Y)O3-x	Perovskite	92281	4	MO	I12/M1	i2 h g
Ba2Pb2BiFe4ScO13	Perovskite, I	290752	5	OR	AMMM	n3 j3 i
Ba3Yb2O5(CO3)	Perovskite	267184	7	TE	P4/MMM	t o2 i l
Ba4CaCu2+xO7-x(CO3)0.5-frame	Perovskite	71237	8	TE	P4/MMM	j i g d

(1 of 7) [1] [2] [3] [4] [5] [6] [7]

There are 104 lines with predefined Structure Type definitions for 'perovskite'. Double-click on an entry in the table above to transfer this type to the search field 'Structure Type'.

Structure Type Search

検索したいstructure typeが見つかったら、ダブルクリックすると、サーチフィールドに自動で記入されるので、「Run Query」で検索。

Structure Type Search

Pre Defined Structure Types

Structure Type

e.g. *Mg2SiO4* or *Olivine* or *Mg2GeS4* or *S1(2)*

Structure Type ^	Alias ^	Prot. ^	Mem. ^	Sys. ^	Sp. Gr. ^	Wy.
Ba6Al2Rh2Ho2O15	Perovskite	72556	4	HE	P-6M2	n2 k j
Ba6Co6ClO16-x	Perovskite	153207	4	HE	P-6M2	n2 k j
Ba8Ga4-x(Ta4+0.6x)O24	Perovskite	183901	2	HE	P63CM	d4 c9
BaFeO3-x	Perovskite	50869	319	HE	P63/MMC	k h f%
BaPbO3(mS20)	Perovskite, E	67811	33	MO	12	i_h g
BaPbO3(ol20)	Perovskite	15933	236	OR	74	_e2_
BaRuO3	Perovskite	10253	27	TG	166	h e c2
BaTbO3	Perovskite	258353	2	TC	P-1	i4 h a
BaTiO3(orh)	Perovskite	31155	116	OR	38	e b a2
BaTiO3(orh)	Perovskite	31155	116	OR	BMM2	e b a3
BaTiO3(orh)	Perovskite	31155	116	OR	38	e b2 a
BaTiO3(orh)	Perovskite	31155	116	OR	BMM2	d b2 a
BaTiO3(tet)	Perovskite, E	67519	154	TE	P4/MMM	e d c i
BaTiO3(tet)	Perovskite, E	67519	154	TE	P4/MMM	f d b a
Bi(Fe0.75Mn0.25)O3	Perovskite	183765	6	OR	62	d8 c4

(2 of 7) < << 1 2 3 4 5 6 7 >> >

There are 104 lines with predefined Structure Type definitions for 'perovskite'. Double-click on an entry in the table above to transfer this type to the search field 'Structure Type'.

Search Action

Run Query Clear Query

Search Summary

Bibliography: -

Cell: -

Chemistry: -

Symmetry: -

Crystal Chemistry: -

Structure Types: -

Experimental Info: -

DB Info: -


Expert: -

Query History

Number of queries: 0

Clear Query History

structure type自体を探すのが難しい場合は、同じタイプをもつ化合物を化合物検索等で探しておき、同じstructure typeを再検索するのが簡単。



化学情報協会

20

検索結果リスト画面

Results: List View # of Hits: 2023

<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Coll. Code	HMS	Struct. Form	Struct. Type	Title	Authors	Reference	Cell Paramet	Standardise	Formula Wei	ANX-Formul	AB-Formula	Publication	☆	↓
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	495	P n m a	Mn (Se O3)	MgSeO3	Crystal chem	Kohn, K.; Inc	Journal of So	6.0945(4) 7.8	6.0945 7.865	181.8970	ABX3	ABC3	1976	☆	<input type="button" value="Export"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	668	F d d d Z	Li Mn2 O4	ZnCr2O4	Reactive milli	Becker, Denn	European Jot	8.1708(5) 8.1	8.1708 8.170	180.8150	A25X32	A24.6B32	2019	☆	<input type="button" value="Export"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	669	F d d d Z	Li Mn2 O4	ZnCr2O4	Reactive milli	Becker, Denn	European Jot	8.219(3) 8.21	8.2190 8.219	180.8150	A3X4	A3B4	2019	☆	<input type="button" value="Export"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	670	F d d d Z	Li Mn2 O4	ZnCr2O4	Reactive milli	Becker, Denn	European Jot	8.1709(5) 8.1	8.1709 8.170	180.8150	A3X4	A3B4	2019	☆	<input type="button" value="Export"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	903	I 4/m m m	Mn8 O10 Cl3		Structure cris	Buisson, G.;	Acta Crystallk	9.2898(6) 9.2	9.2898 9.289	705.8600	AB7X3Y10	A3B8C10	1977	☆	<input type="button" value="Export"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	971	C 1 2/m 1	Cu2 Mn3 O8	Cd2Mn3O8	Structure de	Riou, A.; Lec	Acta Crystallk	9.695(7) 5.63	9.6950 5.635	419.9120	A2B3X8	A2B3C8	1977	☆	<input type="button" value="Export"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1720	P n a a	Mn (P3 O9)		Structure cris	Bagieu Beuct	Acta Crystallk	9.703(3) 10.6	6.3620 10.66	291.8410	AB3X9	AB3C9	1978	☆	<input type="button" value="Export"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1979	P m n 21	Co2 Mn3 O8	Co2Mn3O8	Structure cris	Riou, A.; Lec	Acta Crystallk	5.743(3) 4.91	5.7430 4.915	410.6720	A2B3X8	A2B3C8	1975	☆	<input type="button" value="Export"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	2488	P 1 1 21/b	K6 (Mn2 O6)	K6Mn2O6	K6 Mn2 O6 u	Brachtel, G.;	Zeitschrift fue	8.886(2) 6.76	6.6384 11.39	440.4740	AB3X3	AB3C3	1978	☆	<input type="button" value="Export"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	2574	C m c 21	Pb3 Mn7 O15		Structure cris	Darriet, B.; D	Acta Crystallk	17.28(1) 9.98	17.2800 9.98	1246.1350	A3B7X15	A3B7C15	1978	☆	<input type="button" value="Export"/>

(1 of 203)

一つ以上のデータを選択してから「Show Detailed View」をクリックすると、データ詳細画面になる。

チェックしたデータをエクスポート

1つ以上のデータを選択すると、構造やXRDパターン表示が見られる。2~6個のデータを選択すると、一つの画面で比較できる。

この画面に表示される項目をカスタマイズできる。

このデータをエクスポート。

左の□にチェックを入れると、今回の検索で出てきたすべてのエントリー(この場合2023件)にチェック。右の□にチェックを入れると、このページに表示されているすべてのエントリー(この場合10件)にチェックを入れることができる。

1ページに表示される件数を50個まで増やせる。

データ閲覧画面

データのサマリー

Detailed View Entry 1 of 1

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

Summary Collection Code 495

Struct. formula	Mn (Se O3)	Structure type	MgSeO3
Cell parameter	6.0945(4) 7.8656(8) 5.1460(4) 90. 90. 90.	Space group	P n m a (62)
Cell volume	246.68 [Å ³]	Z	4
Temperature	room temperature	Pressure	atmospheric
Data quality	High quality	R-value	0.034
Author	Kohn, K.; Inoue, K.; Horie, O.; Akimoto, S.;	Title	Crystal chemistry of M Se O3 and M Te O3 (M= Mg, Mn, Co, Ni, Cu and Zn)
Reference	Journal of Solid State Chemistry (1976) 18, p. 27-37 (7 structures)	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		

データ詳細を全展開

データ詳細

Details Expand all Collapse all

Visualization

Published Crystal Structure

62 #62: a, b, c
a=6.095Å
b=7.866Å
c=5.146Å
α=90.000°
β=90.000°
γ=90.000°

Interactive Visualization

Powder Pattern

Interactive Visualization

三次元構造を visualizer で確認。原子間距離や角度なども表示可能。

粉末X線回折パターン、中性子回折パターンの切替えや波長の変更、x-yのエクスポート等が可能。このパターンは、実測値ではなく、結晶学データより計算によって表示させています。

以下は、化合物情報、論文に記載の結晶学データ、スタンダードなセッティングに直した結晶学データ、実験情報等

Chemistry

Sum. formula	Mn1 O3 Se1	Struct. formula	Mn (Se O3)
Molecular weight	181.8970 [u]	Z	4
ANX formula	ABX3	AB formula	ABC3
Chemical name	Manganese selenate(IV)		

Published Crystal Structure Data

Cell parameter	6.0945(4) 7.8656(8) 5.1460(4) 90. 90. 90.	Space group	P n m a (62)
----------------	---	-------------	--------------

データ閲覧画面

Detailed View

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

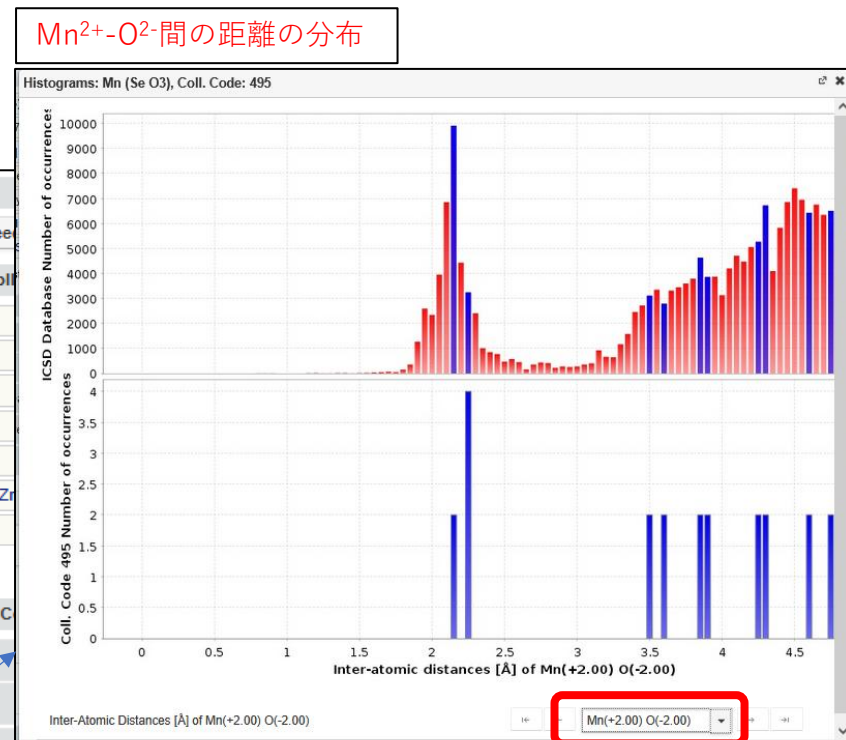
Summary

Struct. formula	Mn (Se O3)	Structure type	MgSeO3
Cell parameter	6.0945(4) 7.8656(8) 5.1460(4) 90. 90. 90.	Space group	P n m a (62)
Cell volume	246.68 [Å ³]	Z	4
Temperature	room temperature	Pressure	atmospheric
Data quality	High quality	R-value	0.034
Author	Kohn, K.; Inoue, K.; Horie, O.; Akimoto, S.;	Title	Crystal chemistry of M Se O3 and M Te O3 (M= Mg, Mn, Co, Ni, Cu and Zr)
Reference	Journal of Solid State Chemistry (1976) 18, p. 27-37 (7 structures)	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

Details

- Visualization
- Chemistry
- Published Crystal Structure Data
- Standardized Crystal Structure Data



Distances and Angles

Select pairs of elements | Select from atom position

Atom A | Atom B | Atom C

Mn | O | Se

Select pairs of elements | Select from atom position

Atom A | Atom B | Atom C

Mn | O | Se

(un)select all

Histograms

Calculate

全原子間距離と角度のリスト表示

複数の候補がある場合、切替

Coll. Code: 495, Mn (Se O3) - 1976 Kohn K. ...

Distances | Angles

DistanceとAngleの表示を切替

	Atom A			Atom B			Symmetry	Distance [Å]
	Lbl	Ox	Wyck	Lbl	Ox	Wyck		
Mn1	+2.00	4b	O1	-2.00	4c	x,y,z 555		2.252
Mn1	+2.00	4b	O1	-2.00	4c	-x,-y,-z 445		2.252
			O2	-2.00	8d	x+1/2,y,-z+1/2 455		2.172
			O2	-2.00	8d	-x+1/2,-y,z+1/2 545		2.172
			O2	-2.00	8d	x,y,z 555		2.280
			O2	-2.00	8d	-x,-y,-z 445		2.280
O1	-2.00	4c	O2	-2.00	8d	x,y,z 554		2.692
O1	-2.00	4c	O2	-2.00	8d	x,-y+1/2,z 554		2.692
			Se1	+4.00	4c	x,y,z 554		1.710
			Se1	+4.00	4c	x+1/2,y,-z+1/2 555		2.921
O2	-2.00	8d	O2	-2.00	8d	x,-y+1/2,z 555		2.618
			O2	-2.00	8d	-x,-y,-z 446		2.894
			Se1	+4.00	4c	x,y,z 555		1.716

ICSD関連資料

- [ICSD 日本語 基本ガイド](#)
- [ICSD Database Scientific Manual 2025 \(英文\)](#)

よくあるご質問①

- ICSD Desktop portable版を使用する際、毎回仮想DVDをマウントしてから起動するのが面倒。

毎回マウントする必要はありません。 仮想DVDをマウントしたら、仮想DVD中の全てのファイルを、C:¥Users¥<username>の中などのクラウド環境ではないハードディスク内か、USBなどにコピー&ペーストしてください。次回から、コピーしたファイル中のstart.cmdから起動可能です。(コピーが完了すれば、製作元のサイトからダウンロードしたファイルは削除可能)

さらに、start.cmdのショートカットをデスクトップに作成すれば、次回からデスクトップのショートカットアイコンから起動できます。



よくあるご質問②

- ICSDの活用方法や具体的な研究事例を知りたい。

[利用紹介 | 化学情報協会](#) では、研究分野別に、ユーザーインタビューや研究事例、研究論文のリストなどを掲載しておりますので、ご覧ください。

ユーザーインタビュー



ICSDを駆使して筑波第一原理計算による革新的な電池材料の探索
一般財団法人ファインセラミックスセンター
ナノ構造研究所 電池材料解析グループ
グループ長・主席研究員
梶原 彰秀 博士



水素エネルギー社会を支える水素吸蔵合金のこれまでとこれから
九州大学 秋葉 悦男 名誉教授



次世代電池に向けた材料開発を支える ICSD API
東京理科大学 理学部第一部 応用化学科 駒場研究室



シミュレーション技術で「マテリアルの知恵」を引き出すー材料開発のスピードアップを可能にするICSDー
三井金属株式会社 機能材料事業本部 機能材料研究所 野島研技術センター



分野の垣根や常識を越えた発想がデータベース活用の鍵になる
東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所 梶野秀雄教授

ユーザー研究事例

— 東北大学金属材料研究所水素機能材料工学研究部門 佐藤登人助教

● [新規水素化合物の材料開発におけるICSDの使い方](#) 300 KB

論文での報告事例

下記の論文の他にも、多数の材料研究の論文でICSDが利用されています。

● [論文リスト](#) 209 KB

Discovery of a Novel Sn(II)-Based Oxide β -SnMoO₄ for Daylight-Driven Photocatalysis
Hiroyuki Hayashi, Shota Katayama, Takahiro Komura, Yoyo Hinuma, Tomoyasu Yokoyama, Ko Mibu, Fumiyasu Oba, Isao Tanaka, *Adv. Sci.*, 2017, 4 (1), 1600246.
● <https://doi.org/10.1002/advs.201600246>

26