

CheckCIFへの対応

日本原子力研究開発機構 J-PARCセンター

大原 高志

E-mail: takashi.ohhara@j-parc.jp

CheckCIFの目的

- CIFファイルに文法上の誤りや記載ミスが無いか？
- 構造解析の過程で何かしらの間違い、見落としをしていないか？
 - 既知構造だった
 - 空間群が違った(対称心を見落としていた)
 - ディスオーダーを見落としていた
 - 原子のアサインを間違えた
 - 必要な手順が抜けていた(吸収補正、消衰効果の補正、etc.)

想定外のアラートが出ていないかどうか、一通り確認を！

Alertへの対応

Alert A: 深刻な問題

Alert B: 潜在的に深刻な問題

Alert C: 要確認

Alert G: 予期せぬ事態でないか確認

✓ Alert A, Alert Bについては、対応が必要

✓ Alert C, Alert Gへの対応を要求される場合も

想定外のアラートがあった場合：

アラートの内容を確認し、必要に応じて構造解析をやり直す

- 対称心を見落としていた
- ディスオーダーを見落としていた
- 重元素を含む結晶なのに吸収補正をスキップしていた

測定上、消せないアラートがある場合：

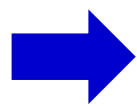
CIFのValidation Reply Form (VRF)にアラートが出る理由を書く

消せないAlertへの対応：VRFへの記載

試料結晶の質や結晶構造の特性上、消すことが現実的に不可能なalertは生じ得る。その場合は、alertが生じる理由をVRFに真摯に記す。

Alert level B

PLAT088_ALERT_3_B Poor Data / Parameter Ratio

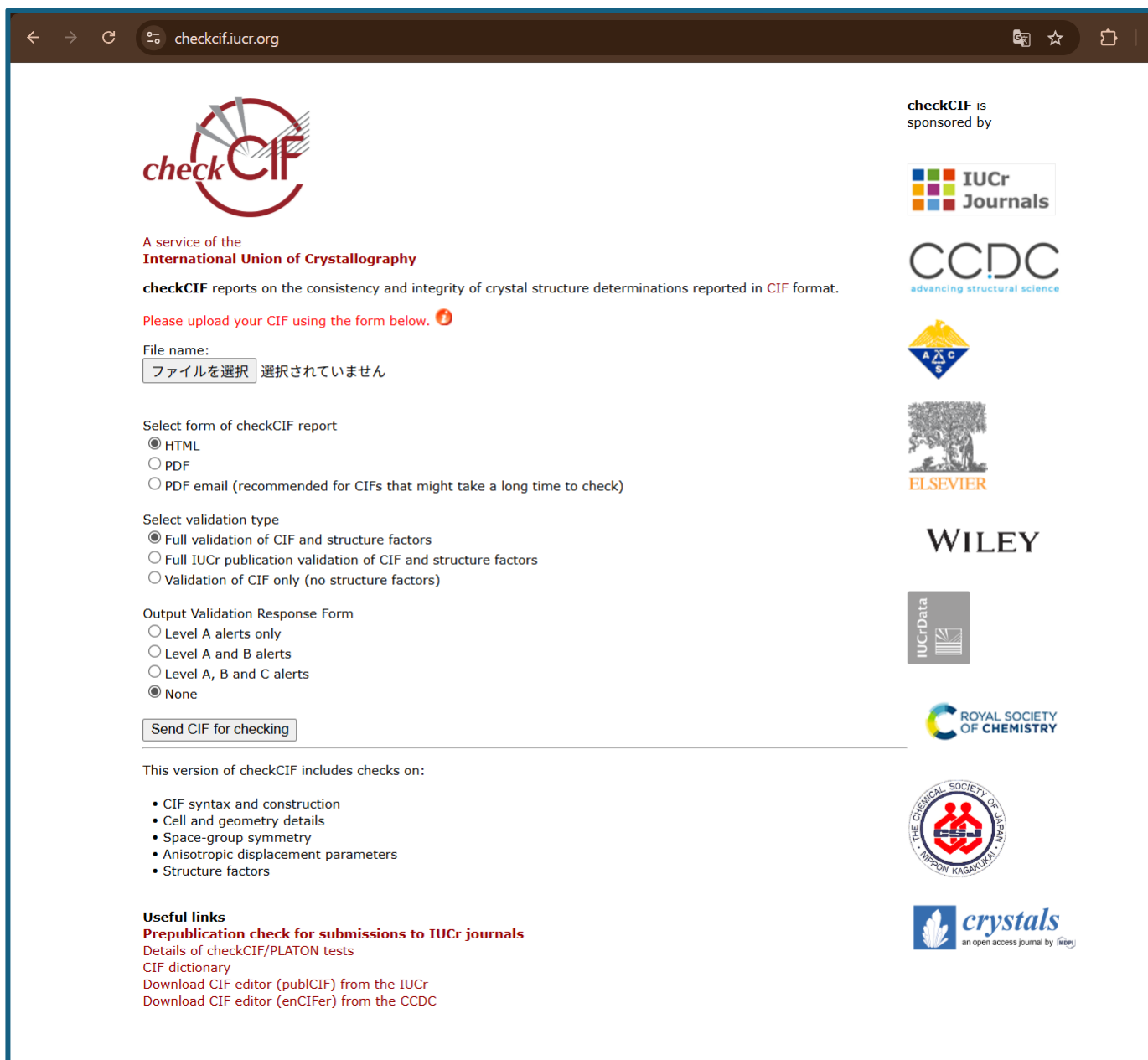


構造のディスオーダーが大きく、反射数/パラメータ数の比が小さく
なってしまった。そのため、構造精密化では適切な束縛条件を用いている。

その他のVRFへの記載例

- 様々な結晶化条件を試したが、これ以上質の高い単結晶が得られなかった
(Rが大きい、結合長のエラーが大きい、等)
- ディスオーダー構造での精密化を試みたが、収束しなかった(残差電子密度
が大きい、異方性温度因子が長細い、等)

https://checkcif.iucr.org



The screenshot shows the checkCIF website interface. At the top left is the checkCIF logo, a red circle with a stylized 'C' and 'I' and the text 'checkCIF'. Below it, it says 'A service of the International Union of Crystallography'. The main heading is 'checkCIF reports on the consistency and integrity of crystal structure determinations reported in CIF format.' Below this is a red message: 'Please upload your CIF using the form below.' with an information icon. The form includes a 'File name:' label and a text input field containing 'ファイルを選択 選択されていません'. There are three radio buttons for 'Select form of checkCIF report': 'HTML' (selected), 'PDF', and 'PDF email (recommended for CIFs that might take a long time to check)'. There are three radio buttons for 'Select validation type': 'Full validation of CIF and structure factors' (selected), 'Full IUCr publication validation of CIF and structure factors', and 'Validation of CIF only (no structure factors)'. There are four radio buttons for 'Output Validation Response Form': 'Level A alerts only', 'Level A and B alerts', 'Level A, B and C alerts', and 'None' (selected). At the bottom of the form is a button labeled 'Send CIF for checking'. Below the form, it says 'This version of checkCIF includes checks on:' followed by a bulleted list: 'CIF syntax and construction', 'Cell and geometry details', 'Space-group symmetry', 'Anisotropic displacement parameters', and 'Structure factors'. At the bottom left, there is a section 'Useful links' with the following links: 'Prepublication check for submissions to IUCr journals', 'Details of checkCIF/PLATON tests', 'CIF dictionary', 'Download CIF editor (publCIF) from the IUCr', and 'Download CIF editor (enCIFer) from the CCDC'. On the right side of the page, there is a vertical list of logos for sponsors: 'checkCIF is sponsored by', 'IUCr Journals', 'CCDC advancing structural science', 'ACS', 'ELSEVIER', 'WILEY', 'IUCrData', 'ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY', 'THE CHEMICAL SOCIETY OF JAPAN', and 'crystals an open access journal by IUCr'.

checkCIF is sponsored by

IUCr Journals

CCDC
advancing structural science

ACS

ELSEVIER

WILEY

IUCrData

ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

THE CHEMICAL SOCIETY OF JAPAN

crystals
an open access journal by IUCr

checkCIF logo

A service of the
International Union of Crystallography

checkCIF reports on the consistency and integrity of crystal structure determinations reported in CIF format.

Please upload your CIF using the form below. ⓘ

File name:
ファイルを選択 選択されていません

Select form of checkCIF report

☒ HTML
☐ PDF
☐ PDF email (recommended for CIFs that might take a long time to check)

Select validation type

☒ Full validation of CIF and structure factors
☐ Full IUCr publication validation of CIF and structure factors
☐ Validation of CIF only (no structure factors)

Output Validation Response Form

☐ Level A alerts only
☐ Level A and B alerts
☐ Level A, B and C alerts
☒ None

Send CIF for checking

This version of checkCIF includes checks on:

- CIF syntax and construction
- Cell and geometry details
- Space-group symmetry
- Anisotropic displacement parameters
- Structure factors

Useful links

Prepublication check for submissions to IUCr journals

Details of checkCIF/PLATON tests

CIF dictionary

Download CIF editor (publCIF) from the IUCr

Download CIF editor (enCIFer) from the CCDC

構造解析を行ったら、先ず CheckCIF

✓ 解析手順を間違えてないか？

✓ 見落としが無いのか？

構造解析を行う上で気を付け
るべき点を、学ぶことに
繋がる