

収録範囲	無機化合物の結晶構造 結晶学 無機化学 材料科学	相転移 物理科学 物性物理	物理学 物性データ 温度物性
ファイル種類	化学物質データベース (数値)		
特長	アラート (自動 SDI 検索) は利用できません		
	CAS RN [®] (CAS 登録番号) <input type="checkbox"/>	ページイメージ <input type="checkbox"/>	STN AnaVist <input type="checkbox"/>
	Keep & Share <input checked="" type="checkbox"/>	中間一致・ 後方一致検索 <input type="checkbox"/>	STN Easy <input type="checkbox"/>
	練習用ファイル <input type="checkbox"/>	構造図 <input type="checkbox"/>	
レコード内容	<ul style="list-style-type: none"> ・無機化合物の完全な構造情報に関するデータ ・書誌情報に加え、化合物名、分子式、結晶対照群、単位格子パラメーター、原子座標、温度因子を収録。 ・CIF 形式のファイルのダウンロードが可能 		
レコード数	169,800 件 (2014 年 10 月現在)		
収録年代	1913 年以降		
更新頻度	年 2 回 (リロード毎約 5,000 件が追加)		
言語	英語		
データベース 製作者	National Institute of Standards and Technology (NIST) Gaithersburg, MD 20899 U. S. A. 著作権保有者		
データベース 代理店	FIZ Karlsruhe STN Europe P. O. Box 2465 76012 Karlsruhe Germany Phone: +49-7247-808-555 Fax: +49-7247-808-259 E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de		
収録源	雑誌 単行本		
検索補助資料	<ul style="list-style-type: none"> ・STN 技術資料 http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc_01.html ・オンラインヘルプ => <u>HELP DIRECTORY</u> ですべての利用可能なヘルプメッセージが表示されます ・STNGUIDE ファイル 		
利用可能な クラスター	AUTHORS	NUMERIC	

ヨーロッパ
STN カールスルーエ

 FIZ Karlsruhe
 P.O. Box 2465
 76012 Karlsruhe
 Germany
 Phone: +49-7247-808-555
 Fax: +49-7247-808-259
 E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de
 Internet: www.stn-international.de

日本
STN 東京
化学情報協会

 〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
 Phone: 0120-003-462 (Help Desk)
 : 0120-151-462 (上記以外)
 Fax: 03-5978-4090
 E-mail: support@jaici.or.jp (Help Desk)
 customer@jaici.or.jp (上記以外)
 Internet: www.jaici.or.jp

北アメリカ
STN コロンバス

 CAS
 P.O. Box 3012
 Columbus, Ohio 43210-0012 U.S.A.
 CAS Customer Care:
 Phone: 800-753-4227 (North America)
 614-447-3700 (worldwide)
 Fax: 614-447-3751
 E-mail: help@cas.org
 Internet: www.cas.org

データベースサマリーシート作成 : 化学情報協会

検索フィールド

このファイルには後方一致検索可能なフィールドはありません。

検索フィールド

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
なし または /BI	基本索引 * 化合物名 (/CN), 示性式 (/LSF), 標題 (/TI), 補遺語 (/ST) (以上からの切出し語)	S POWDER DIFFRACTION	CN, LSF, TI, ST
/AN /ATC /AU /CCLS /CDAT /CLP.NFU /CLP.VOL /CN /CNS /CSG /CSYM /CSYS /DED /DEN /ELC /元素記号 /ELS /FA /FTYP /JT /LAU /LSF /MF /MID /MID.ELP /OXS /PG /PRS /PY /RVAL /SO /ST /TFLG /TI /UP	レコード番号 ^{1,2)} 原子数 ²⁾ 著者名 ¹⁾ 結晶クラス ¹⁾ 訂正日 ^{1,2)} 結晶格子パラメータ: 単位格子中の構造単位数 ²⁾ 単位格子体積 ^{1), 2)} 化学物質名と鉱物名 ¹⁾ 化学物質名称セグメント ¹⁾ 結晶空間群 ¹⁾ 結晶対称性 (Centering, Polarity) ¹⁾ 結晶系 ¹⁾ データベース入力日 ²⁾ 密度 (実測値) ²⁾ 元素数 ²⁾ 特定元素の数 ²⁾ 元素記号 ¹⁾ フィールドの存在 分子タイプ (ANX-Form) ¹⁾ 雑誌名 Laue 分類 ¹⁾ 示性式 ¹⁾ 分子式 ¹⁾ 最小原子間距離 ²⁾ 元素対 酸化状態 ²⁾ 周期律グループ Pearson 記号 ¹⁾ 発行年 ²⁾ R 因子 ²⁾ 収録源 (CODEN, 雑誌名, 発行年を含む) 補遺語 ¹⁾ テストフラグ ¹⁾ 標題 ¹⁾ 更新日 ²⁾	S 60419/AN S 3-4/ATC S SMITH?/AU S C2H/CCLS S 880118/CDAT S 3/CLP.NFU S 20-80/CLP.VOL S HALITE?/CN S ALUMINIUM/CNS S CHLORO/CNS S A1A1/CSG S NCEN/CSYM S CUB/CSYS S 19880715/DED S 1.2-1.5/DEN S 3/ELC S 3/AL S 2.4/AL S BA/ELS S CSYS/FA S ABX2/FTYP S AB2X4/FTYP S ACTA METALLURGICA/JT S MMM/LAU S AL2 O3/LSF S AG3 AL22 O34/MF S 1<MID<1.1 S 1-1.1/MID S AG-AG/MID.ELP S AG-AG/MID.ELP AND 0.5-0.6/MID S 2/OXS S A1/PG S AP17/PRS S 1960-1970/PY S 0.3-0.4/RVAL S LESS COMMON METALS/SO S STRUCTURE CALCULATED?/ST S UNUSUAL/TFLG S ALUMINATES/TI S UP>JAN 2000	AN MF AU CCLS CDAT CLP CLP CN CN CSG CSYM CSYS DED DEN MF MF FA FTYP SO LAU LSF MF MID MID OXS 表示されない PRS SO RVAL SO ST TFLG TI UP

1) ヒットタームハイライトが利用できます。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

表示形式

回答の表示をする際は、下記の表示形式を自由に組み合わせることができます。

複数のコードはスペースやカンマで区切ってください。フィールドは指定された順序で表示されます。

入力例： => D L1 1-5 BIB

=> D L1 TI AU

カスタム表示形式

DISPLAY コード	英語名	内容	入力例
AN	Accession Number	レコード番号	D AN 1-6
ATP	Atomic Parameter	原子パラメータ	D L5 ATP
AU	Author	著者名	D L8 AU 10-20
CCLS	Crystal Class	結晶クラス	D CCLS 5-10
CDAT	Correction Date	訂正日	D CDAT L3 1-5
CLP	Crystal Lattice Parameters	結晶格子パラメーター	D CLP
CN	Chemical Name and Mineral Name	化合物名称と鉱物名	D 1-4 CN
CSG	Crystallographic Space Group	結晶空間群	D CSG
CSYM	Crystal Symmetry (Centering, Polarity)	結晶対称性	D CSYM 10
CSYS	Crystal System	結晶系	D CSYS
DED	Database Entry Date	データベース入力日	D DED
DEN	Experimental Density	密度 (実測値)	D DEN
FA	Field Availability	フィールドの存在	D FA
FTYP	Formula Type (ANX-Form)	分子式タイプ	D FTYP 1-3
LAU	Laue Class	Laue 分類	D LAU 1-5
LSF	Linearized Structural Formula	示性式	D L6 10-15 LSF
MF	Molecular Formula	分子式	D MF
MID ¹⁾	Minimum Interatomic Distance	最小原子間距離	D MID
OXS ¹⁾	Oxidation State	酸化状態	D OXS
PRS	Pearson Symbol	Pearson 記号	D PRS
RVAL	R-Value	R 因子	D RVAL 1-10
SO	Source	収録源	D SO
ST	Supplementary Term	補遺語	D L10 1-5 ST
TF	Temperature Factor	温度因子	D TF
TFLG	Test Flag	ラストフラグ	D TFLG 2
TI	Title	標題	D L9 1-6 TI
UP ¹⁾	Update Date	更新日	D UP

1) カスタム表示形式でのみ表示可能

定型表示形式

定型表示形式	内容	入力例
ALL	IDE, BIB, CELL, DDES, PARM	D ALL L11
BIB	AN, TI, AU, SO	D 8 BIB
CELL	AN, CLP, DEN, CSG, RVAL, ST	D 10 CELL
CIF ¹⁾	ALL, with special formatting (see HELP DNLDFORMATS)	D CIF
DDES	AN, LAU, PRS, CCLS, CSYS, CSYM, FTYP	D 1-3 DDES
IDE	AN, CN, LSF, MF	D L1 1-5 IDE
PARM	AN, ATP, TF, TFLG	D L4 5 PARM
QRD (デフォルト)	検索式に関連するデータ	D QRD
TRIAL	AN, CN, TI, AU	D OCC

1) CIF 形式ファイルを直接ダウンロードできます。詳細は => [HELP DNLDFORMATS](#) をご覧ください

■ ヒットタームに関する表示形式

すべての検索フィールドでヒットタームハイライト機能が使えます。(検索時にハイライト機能を ON にしておく必要があります)

DISPLAY コード	内容	入力例
HIT	ヒットタームを含むフィールド	D HIT
KWIC	ヒットタームの前後 20 語 (KeyWord-In-Context)	D KWIC
OCC (無料)	ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示	D OCC

■ CIF 形式ファイルのダウンロード

DOWNLOAD コマンドを使うと CIF 形式ファイルを直接ダウンロードできます。ダウンロードしたファイルは Transcript と同じフォルダに保存されます。

デフォルトの保存先 : C:\Users\[ユーザー名]\Documents\STN Express 8.5\Trnscrip

=> DOWNLOAD CIF

```

ENTER (L1), L#, ACC OR ?:L1                ← L 番号の入力
ENTER ANSWER NUMBER OR RANGE (1):1          ← 回答番号の入力
ENTER HIGHLIGHT or NOHIGHLIGHT:NONHIGHLIGHT ← ハイライトする/しないを入力
VALID DOWNLOAD OPTIONS ARE 'CIF, CAPT'
ENTER DOWNLOAD OPTION(CIF) :CIF             ← CIF と入力
ENTER FILENAME OR (?):CHROMIUM             ← ファイル名を入力
TEXT DATA WILL BE DOWNLOADED TO '601658.CIF' USING 'CIF'
START DOWNLOAD (Y)?:Y                       ← Y と入力
    
```

SELECT, ANALYZE および SORT フィールド

SELECT/ANALYZE コマンドは抽出・解析用のコマンドです。

入力例： => SEL L1 CN (回答セット L1 の回答全件から化学物質名と鉱物名を抽出する)

=> ANA L1 1- CSD (回答セット L1 の回答全件から結晶空間群を解析する)

SORT コマンドは指定したフィールドのアルファベット順または数値順に検索結果を並び替えるコマンドです。入力例： => SORT L1 AU (回答セット L1 の回答全件をアルファベット順に並び替える)

○ は SELECT/ANALYZE/SORT 可能なコード, × は不可能なコードです。

SELECT/ANALYZE/ SORT コード	内容	ANALYZE/SELECT ¹⁾	SORT
AN	レコード番号	○	×
AU	著者名	○	○
CHEM	化学物質名称セグメントと分子式	○ ²⁾	○
CN	化学物質名と鉱物名	○	○
CNS	化学物質名称セグメント	○	○
CODEN	CODEN	×	○
CDAT	訂正日	○	○
CCLS	結晶クラス	○	○
CSYM	結晶対称性 (Centering, Polarity)	○	○
CSYS	結晶系	○	○
CSG	結晶空間群	○	×
DED	データベース入力日	○	○
FA	フィールドの存在	○ ³⁾	×
FTYP	分子式タイプ (ANX-Form)	○	○
JT	雑誌名	○ ³⁾	○
LAU	Laue 分類	○	○
LSF	示性式	○	○
MF	分子式	○ (デフォルト)	○
OCC	ヒットタームの出現頻度	×	○
PRS	Pearson 記号	○	○
PY	発行年	○ ³⁾	○
SO	収録源	○ ^{3, 4)}	×
ST	補遺語	○	×
TFLG	テストフラグ	○	×
TI	標題	○	○

1) ヒットタームだけを抽出させるには, HIT を使います。例: => SEL HIT TI

2) 抽出されたタームに /BI が付与されます。

3) このフィールドでは SELECT HIT や ANALYZE HIT を利用できません。

4) CODEN が SELECT/ANALYZE された場合, 抽出されたタームに /SO が付与されます。

サンプルレコード

ALL 表示形式

レコード番号 AN 625747 ICSD Full-text
 化学物質名称 CN Chromium copper hexathiodiphosphate(IV)
 示性式 LSF (Cr Cu) P2 S6
 分子式 MF Cr1 Cu1 P2 S6
 標題 TI Structural aspects and magnetic properties of the lamellar compound Cu_{0.50} Cr_{0.50} P S₃
 著者名 AU Colombet, P.; Leblanc, A.; Danot, M.; Rouxel, J.
 収録源 SO Journal of Solid State Chemistry. (1982) Vol. 41 p. 174-184; CODEN=JSSCB1
 結晶格子 CLP A=5.916(1) B=10.246(2) C=13.415(5) unit: Angstrom
 パラメーター ALPHA=90.0 BETA=107.09(3) GAMMA=90.0 unit: Degrees
 NFU 4.000
 VOL 777.25 Angstrom**3

密度 (実測値) DEN 3.08 g/cm**3
 結晶空間群 CSG C12/C1; 15
 1 'x, -y, z+1/2'
 2 '-x, -y, -z'
 3 '-x, y, -z+1/2'
 4 'x, y, z'
 5 'x+1/2, -y+1/2, z+1/2'
 6 '-x+1/2, -y+1/2, -z'
 7 '-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
 8 'x+1/2, y+1/2, z'

R 因子 RVAL 0.056000
 補遺語 ST Cell and Type only determined by the author(s). Coordinates estimated by the editor in analogy to isotypic compounds.
 Metals formula record: Cr_{0.50} Cu_{0.50} P S₃ (z = 8) CC
 Metals structure type Cr Cu P2 S6
 Temperature factors available
 X-ray diffraction from single crystal

Laue 分類 LAU 2/m
 Pearson 記号 PRS MS40
 結晶クラス CCLS 2/M; C2H
 結晶系 GSYS MON
 結晶対称性 GSYM CEN; NPOL
 分子タイプ FTYP ABC2X6

原子パラメーター ATP Atomic Parameters

At	Nr	Ox	Wy	X	Y	Z	SOF
Cr	1	3	4e	0	0.3351(1)	0.25	1
Cu	1	1	8f	0.0607(5)	0.0021(3)	0.3482(5)	0.33
Cu	2	1	8f	0.4966(37)	0.5020(9)	0.2670(14)	0.17
P	1	4	8f	0.0533(2)	0.3319(1)	0.8344(1)	1
S	1	-2	8f	0.2471(2)	0.1823(1)	0.3736(1)	1
S	2	-2	8f	0.2656(2)	0.1724(1)	0.8736(1)	1
S	3	-2	8f	0.724	0.996	0.376	1

温度因子 TF Temperature Factors unit: Angstrom **2

Atom	U(1, 1)	U(2, 2)	U(3, 3)	U(1, 2)	U(1, 3)	U(2, 3)
Cr	1	.0053(3)	.0082(4)	.0108(3)	-.0054(13)	.0022(2)
Cu	1	.0241(11)	.0127(10)	.1709(46)	.0000(9)	.0510(20)
Cu	2	.0448(33)	.0503(37)	.0888(123)	.0007(47)	.0384(75)
P	1	.0061(3)	.0093(4)	.0109(4)	-.0002(3)	.0021(3)
S	1	.0085(3)	.0149(4)	.0168(4)	.0041(4)	.0067(3)
S	2	.0114(3)	.0135(4)	.0162(4)	.0056(3)	.0076(3)

テストフラグ TFLG Unusual difference between calculated and measured density