

ICSD-Desktop / ICSD Web 基本ガイド

(Ver. 2.0, January / 2015)

ICSD Web の画面を使用。画面や機能は 2015 年 1 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. それぞれの検索結果の詳細を見る	4
3-3. 個別に cif ファイルを保存する	7
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	8
6. “Query Management”で検索の掛合せ(AND,OR,NOT)を行う	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)	9

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。

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
HP : <http://www.jaici.or.jp/>

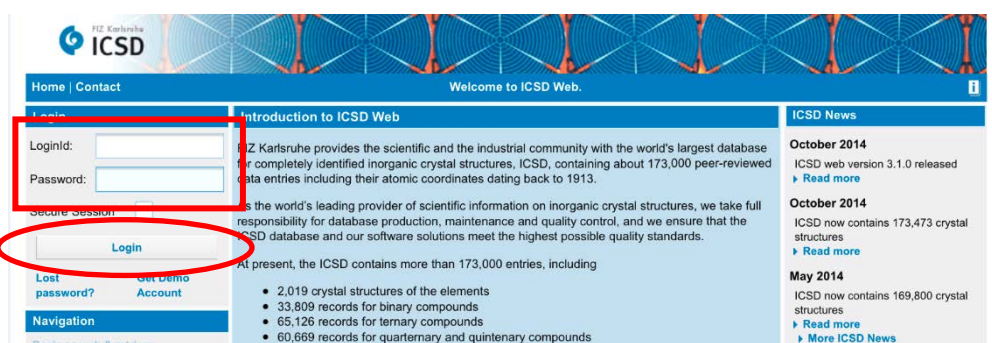
1. ICSD-Desktop を起動する / ICSD Web へログインする

(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。

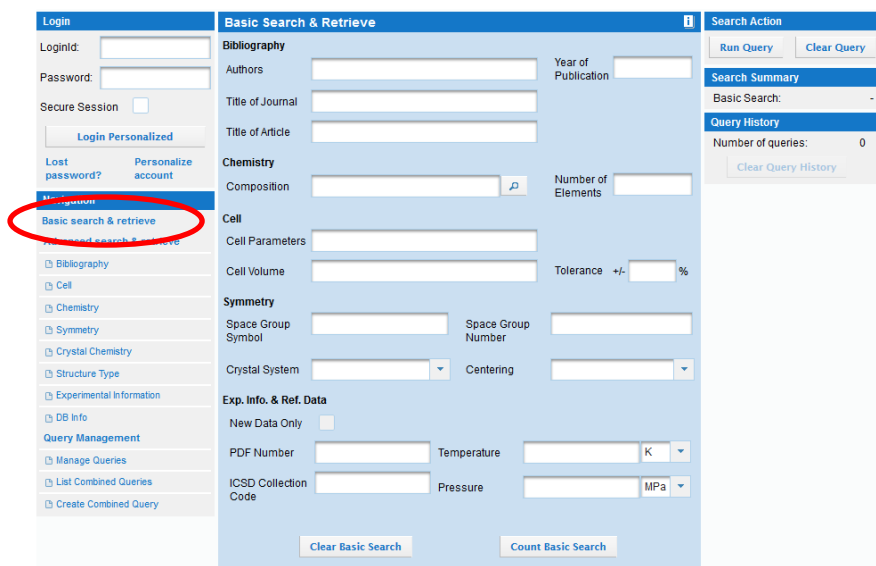
(2) ICSD Web にログインする

ICSD Web のホームページ (<http://icsd.fiz-karlsruhe.de/icsd/>) へアクセスします。IP アドレスを登録している場合、ログインは自動認識されますので、自動的に 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 **5.**を参照してください。）




検索条件は手入力または、選択肢から入力できます。検索項目の空欄に下図のように検索したい文字を入力すると、候補が表示されます。

文字による検索では、ワイルドカード (*) を使用できます。

ICDD の PDF 番号からも検索できます。

数値検索の項目には、>, >=, <, <= を使用できます。

クリックすると、それぞれの検索条件の説明と入力例が表示されます。

また、Composition の右横の虫眼鏡  をクリックすると、周期表が現れ、元素を選んで検索できます。必要な条件を入力したら、右上の"Run Query"をクリックすると検索が開始されます。

AND, OR, NOT 検索ができます。AND 検索は元素をそのまま続けて記入, OR 検索は()を。NOT 検索は「-」を使用します。
(例)
Na Cl と記入すると Na AND Cl
Na (Cl Br) と記入すると Na AND (Cl OR Br)
Na (Cl Br) -O と記入すると Na AND (Cl OR Br) AND NOT O

3. 検索結果を見る

2.で検索条件を設定し、右上の"Run Query"をクリックし検索すると、検索結果が表示されます。

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されます。

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の追加・削除方法の説明

3-3. 参照

Coll. Code	HMS	Struct. Form.	Struct. Type	Title	Authors	Reference
55431	P-1	(Cu _{0.55} Co _{0.29} Ni _{0.16})Cu ₄ (AsO ₄) ₂ (AsO ₃ (OH)) ₂ (H ₂ O) _{8.86}		Crystal structure of lindackerite, (Cu, Co, Ni)Cu ₄ (AsO ₄) ₂ (AsO ₃ (OH)) ₂ * 9(H ₂ O) from Jachymov, Czech Republic	Hybler, J.; Ondrus, P.; Cisarova, I.; Petricek, V.; Veselovsky, F.	European Journal of Mineralogy (2003) 15, p1035-p1042
82754	P 1 21 1	(Cu _{0.68} Ni _{0.15} Co _{0.06} Fe _{0.11})S ₂	(Cu,Ni,Co,Fe)S ₂	Villamaninite, a case of noncubic pyrite-type structure	Marcos, C.; Paniagua, A.; Moreiras, D.B.; Garcia Granda, S.; Diaz, M.R.	Acta Crystallographica, Section B: Structural Science (1996) 52, p899-p904
82755	P 1 21 1	(Cu _{0.53} Ni _{0.27} Co _{0.13} Fe _{0.07})S ₂	(Cu,Ni,Co,Fe)S ₂	Villamaninite, a case of noncubic pyrite-type structure	Marcos, C.; Paniagua, A.; Moreiras, D.B.; Garcia Granda, S.; Diaz, M.R.	Acta Crystallographica, Section B: Structural Science (1996) 52, p899-p904
95233	141/a m d Z	(Mn _{0.655} Co _{0.19} Ni _{0.155} Mn _{0.697} Cu _{0.045} Ni _{0.258}) ₂ O ₄	CdMn ₂ O ₄	Microstructure, crystal structure and electrical properties of Cu _{0.1} Ni _{0.8} Co _{0.2} Mn _{1.9} O ₄ ceramics obtained at different sintering conditions	Bodak, O.; Aksefrud, L.G.; Demchenko, P.; Kotur, B.; Mrooz, O.; Hadzaman, I.; Shpotyuk, O.; Aldinger, F.; Seifert, H.; Volkov,	Journal of Applied Crystallography (2007) 40, p14-p23

3-2. それぞれの検索結果の詳細を見る

確認したいデータに、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"と"Export Selected Data"を選べるようになります。2つ以上選択すると、"Show Synoptic View"も選べます。

Coll. Code	HMS	Struct. Form.	Struct. Type	Title	Authors	Reference
<input checked="" type="checkbox"/> 55431	P-1	(Cu _{0.55} Co _{0.29} Ni _{0.16})Cu ₄ (AsO ₄) ₂ (AsO ₃ (OH)) ₂ (H ₂ O) _{8.86}		Crystal structure of lindackerite, (Cu, Co, Ni)Cu ₄ (AsO ₄) ₂ (AsO ₃ (OH)) ₂ * 9(H ₂ O) from Jachymov, Czech Republic	Hybler, J.; Ondrus, P.; Cisarova, I.; Petricek, V.; Veselovsky, F.	European Journal of Mineralogy (2003) 15, p1035-p1042
<input type="checkbox"/> 82754	P 1 21 1	(Cu _{0.68} Ni _{0.15} Co _{0.06} Fe _{0.11})S ₂	(Cu,Ni,Co,Fe)S ₂	Villamaninite, a case of noncubic pyrite-type structure	Marcos, C.; Paniagua, A.; Moreiras, D.B.; Garcia Granda, S.; Diaz, M.R.	Acta Crystallographica, Section B: Structural Science (1996) 52, p899-p904
<input checked="" type="checkbox"/> 82755	P 1 21 1	(Cu _{0.53} Ni _{0.27} Co _{0.13} Fe _{0.07})S ₂	(Cu,Ni,Co,Fe)S ₂	Villamaninite, a case of noncubic pyrite-type structure	Marcos, C.; Paniagua, A.; Moreiras, D.B.; Garcia Granda, S.; Diaz, M.R.	Acta Crystallographica, Section B: Structural Science (1996) 52, p899-p904

<画面の下部>

<input type="checkbox"/> 155284	R-3 m H	Li Co O ₂	NaCrS ₂	Condensed layered pentaphosphate crystals. Synthesis and structural refinement of Li Al _x Co _{1-x} O ₂ system	Nasir Khan, M.; Bashir, J.	Materials Chemistry (2012) 12, p1-6
---------------------------------	---------	----------------------	--------------------	--	----------------------------	-------------------------------------

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。

[1-10] [11-20] [21-30] [31-40] [41-50] [51-60] [61-70] [71-80] [LastPage]

(1) **Show Detailed View** : 結晶構造データの詳細が表示されます。

選択したデータについて、それぞれの構造データの詳細が表示されます。右上の"Back to Query"をクリックすると検索条件の設定画面へ、"Back to List View"で検索結果画面へ戻ります。

クリクすると詳細が表示されます。

選択したデータ間で、詳細表示が切り替わります。

クリクすると詳細が表示されます。

(2) **Show Synoptic View** : 選択したデータだけのリストが表示されます。

選択したデータの結晶構造や粉末X線回折パターンを、一度に6個まで同時に表示できます。

表示したいデータを選択します。

粉末パターンを重ねて表示・比較できます。

(3) **Export Selected Data** : データを cif ファイルで保存します。

検索したデータの cif ファイルを保存する場合, "Export Data"をクリックしてください。

Navigation

- Search & Retrieve
- Display
 - List View
 - Detailed View
 - Synoptic View
 - Export Data**

Synoptic View: Selected Entries

Display Crystal Structures | Display Powder Patterns | Back to List View | Back to Query

Coll. Code	HMS	Struct. Form.	Struct. Type	Title	Authors	Reference
<input checked="" type="checkbox"/> 55431	P -1	(Cu _{0.55} Co _{0.29} Ni _{0.16}) Cu ₄ (As O ₄) ₂ (As O ₃ (O H)) ₂ (H ₂ O) _{8.86}		Crystal structure of lindackerite, (Cu, Co, Ni) Cu ₄ (As O ₄) ₂ (As O ₃ H) ₂ * 9(H ₂ O) from Jachymov, Czech Republic	Hybler, J.; Ondrus, P.; Cisarova, I.; Petricek, V.; Veselovsky, F.	European Journal of Mineralogy (2003) 15, p1035-p1042
<input checked="" type="checkbox"/> 82755	P 1 21 1	(Cu _{0.53} Ni _{0.27} Co _{0.13} Fe _{0.07}) S ₂	(Cu,Ni,Co,Fe)S ₂	Villamaninite, a case of noncubic pyrite-type structure	Marcos, C.; Paniagua, A.; Moreiras, D.B.; Garcia Granda, S.; Diaz, M.R.	Acta Crystallographica, Section B: Structural Science (1996) 52, p899-p904
<input checked="" type="checkbox"/> 95233	I 41/a m d Z	(Mn _{0.655} Co _{0.19} Ni _{0.155}) (Mn _{0.697} Cu _{0.045} Ni _{0.258}) ₂ O ₄	CdMn ₂ O ₄	Microstructure, crystal structure and electrical properties of Cu _{0.1} Ni _{0.8} Co _{0.2} Mn _{1.9} O ₄ ceramics obtained at different sintering conditions	Bodak, O.; Aksefrud, L.G.; Demchenko, P.; Kotur, B.; Mrooz, O.; Hadzaman, I.; Shpotyuk, O.; Aldinger, F.; Seifert, H.; Volkov, S.; Pekhnyo, V.	Journal of Alloys and Compounds (2002) 347, p14-p23

"Single CIF File"または"Multiple CIF File"をクリックします。"Single CIF File"の場合, 選択した複数のデータをひとつの cif ファイルとして保存します。"Multiple CIF File"の場合, 選択した複数のデータを個別の cif ファイルとして保存します。"Multiple CIF File"でファイルの保存を行う場合, ダウンロードは1個の zip ファイルで一括して行われます。

Navigation

- Search & Retrieve
- Display
 - List View
 - Detailed View
 - Synoptic View
 - Export Data

List Report: Export Selected Data

Enter Filename: MyBaseFileName


Single CIF File MyBaseFileName.cif CSV Table MyBaseFileName.csv Back to List View
 Multiple CIF Files MyBaseFileNameX.cif Excel Table MyBaseFileName.xls Back to Query

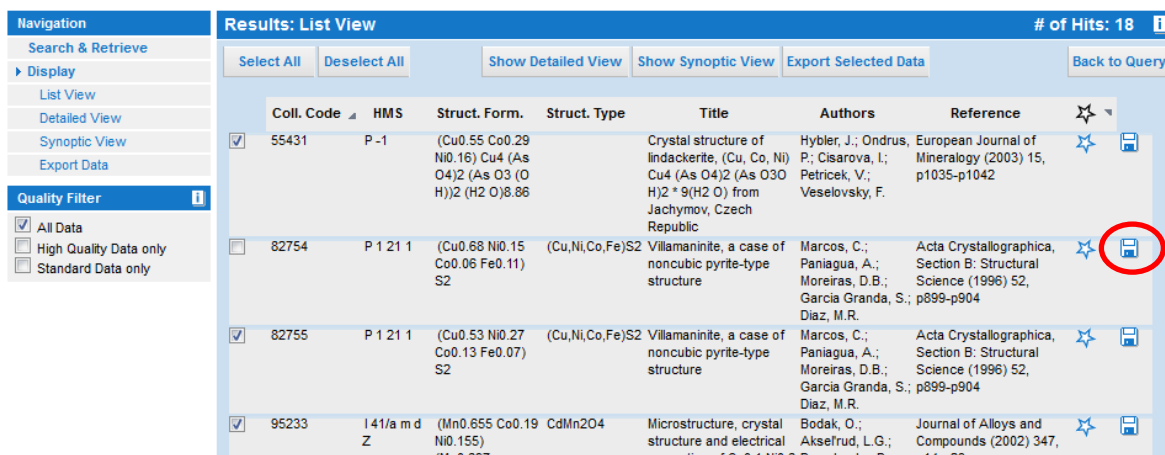
それぞれのファイル形式についての説明。









保存したいデータを選択します。

Coll. Code	HMS	Struct. Form.	Struct. Type	Title	Authors	Reference
<input checked="" type="checkbox"/> 55431	P -1	(Cu _{0.55} Co _{0.29} Ni _{0.16}) Cu ₄ (As O ₄) ₂ (As O ₃ (O H)) ₂ (H ₂ O) _{8.86}		Crystal structure of lindackerite, (Cu, Co, Ni) Cu ₄ (As O ₄) ₂ (As O ₃ H) ₂ * 9(H ₂ O) from Jachymov, Czech Republic	Hybler, J.; Ondrus, P.; Cisarova, I.; Petricek, V.; Veselovsky, F.	European Journal of Mineralogy (2003) 15, p1035-p1042
<input checked="" type="checkbox"/> 82755	P 1 21 1	(Cu _{0.53} Ni _{0.27} Co _{0.13} Fe _{0.07}) S ₂	(Cu,Ni,Co,Fe)S ₂	Villamaninite, a case of noncubic pyrite-type structure	Marcos, C.; Paniagua, A.; Moreiras, D.B.; Garcia Granda, S.; Diaz, M.R.	Acta Crystallographica, Section B: Structural Science (1996) 52, p899-p904
<input checked="" type="checkbox"/> 95233	I 41/a m d Z	(Mn _{0.655} Co _{0.19} Ni _{0.155}) (Mn _{0.697} Cu _{0.045} Ni _{0.258}) ₂ O ₄	CdMn ₂ O ₄	Microstructure, crystal structure and electrical properties of Cu _{0.1} Ni _{0.8} Co _{0.2} Mn _{1.9} O ₄ ceramics obtained at different sintering conditions	Bodak, O.; Aksefrud, L.G.; Demchenko, P.; Kotur, B.; Mrooz, O.; Hadzaman, I.; Shpotyuk, O.; Aldinger, F.; Seifert, H.; Volkov, S.; Pekhnyo, V.	Journal of Alloys and Compounds (2002) 347, p14-p23

3-3. 個別に cif ファイルを保存する

3-2.(3)では、チェックマークで選択したデータを一括して保存する方法を説明しました。検索結果の一覧画面でディスク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、そのデータを個別に cif ファイルで保存できます。

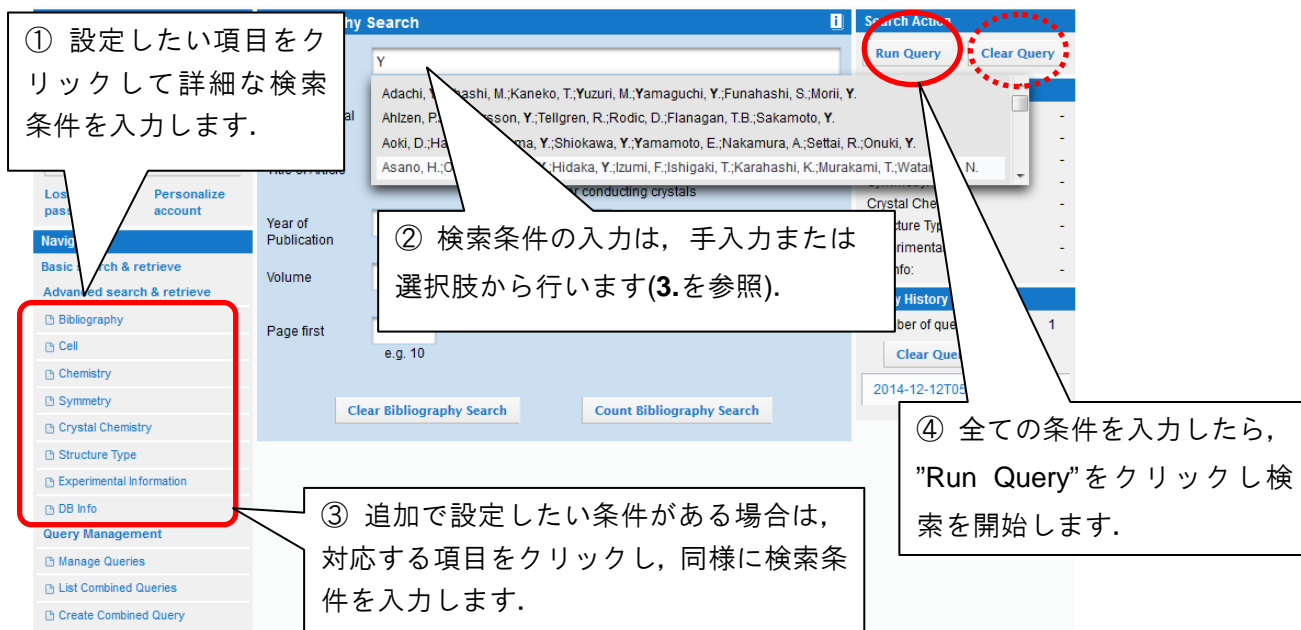


Coll. Code	HMS	Struct. Form.	Struct. Type	Title	Authors	Reference	Actions	
<input checked="" type="checkbox"/>	55431	P-1	(Cu _{0.55} Co _{0.29} Ni _{0.16})Cu ₄ (AsO ₄) ₂ (AsO ₃ (OH)) ₂ (H ₂ O) _{8.86}		Crystal structure of lindackerite, (Cu, Co, Ni)Cu ₄ (AsO ₄) ₂ (AsO ₃ (OH)) ₂ * 9(H ₂ O) from Jachymov, Czech Republic	Hybler, J.; Ondrus, P.; Cisarova, I.; Petricek, V.; Veselovsky, F.	European Journal of Mineralogy (2003) 15, p1035-p1042	 
<input type="checkbox"/>	82754	P 1 21 1	(Cu _{0.68} Ni _{0.15} Co _{0.06} Fe _{0.11})S ₂	(Cu,Ni,Co,Fe)S ₂	Villamaninite, a case of noncubic pyrite-type structure	Marcos, C.; Paniagua, A.; Moreiras, D.B.; Garcia Granda, S.; Diaz, M.R.	Acta Crystallographica, Section B: Structural Science (1996) 52, p899-p904	 
<input checked="" type="checkbox"/>	82755	P 1 21 1	(Cu _{0.53} Ni _{0.27} Co _{0.13} Fe _{0.07})S ₂	(Cu,Ni,Co,Fe)S ₂	Villamaninite, a case of noncubic pyrite-type structure	Marcos, C.; Paniagua, A.; Moreiras, D.B.; Garcia Granda, S.; Diaz, M.R.	Acta Crystallographica, Section B: Structural Science (1996) 52, p899-p904	 
<input checked="" type="checkbox"/>	95233	I 41/a m d Z	(Mn _{0.655} Co _{0.19} Ni _{0.155})	CdMn ₂ O ₄	Microstructure, crystal structure and electrical properties of CdMn ₂ O ₄	Bodak, O.; Aksefrud, L.G.; Demchuk, B.	Journal of Alloys and Compounds (2002) 347, p14-p22	 

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”の 8 項目について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。



① 設定したい項目をクリックして詳細な検索条件を入力します。

② 検索条件の入力は、手入力または選択肢から行います(3.を参照)。

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

④ 全ての条件を入力したら，“Run Query”をクリックし検索を開始します。

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 of History に検索条件のセット名(検索時刻などで表示)と検索件数が示されています。検索条件名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 アドレス認証の後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条件の履歴が残ります。ICSD-Desktop ではログインの必要なく、履歴が残ります。

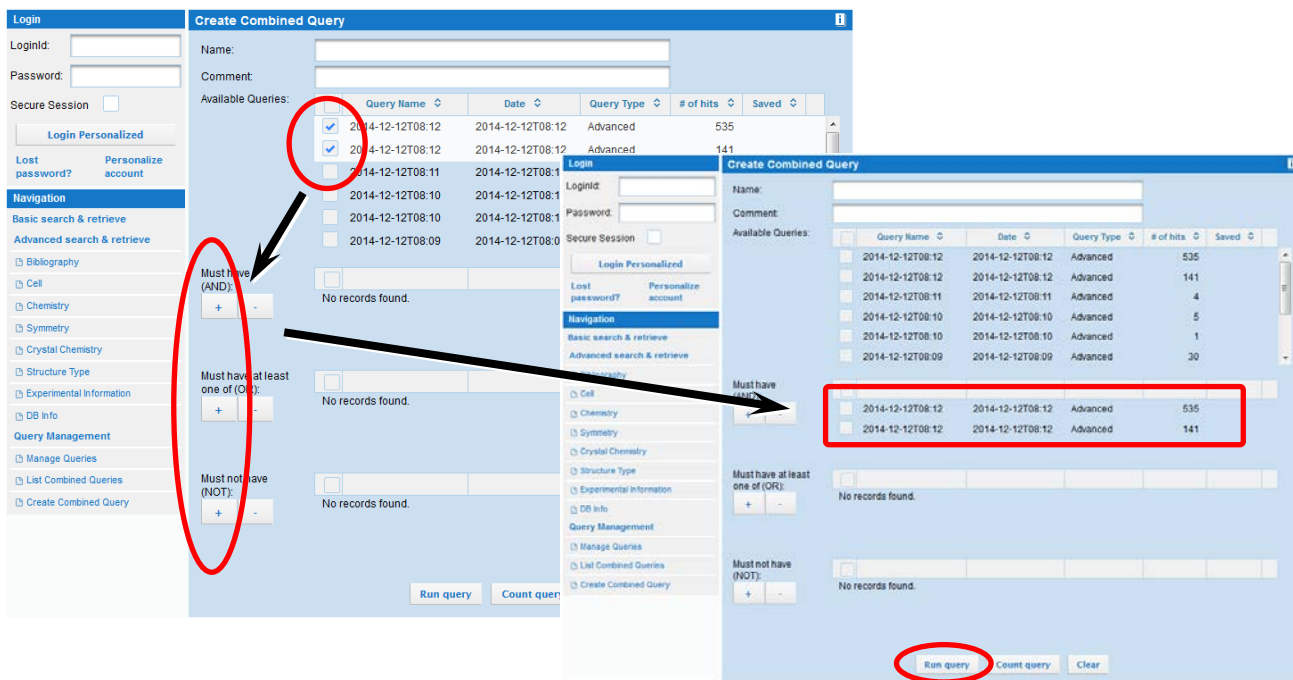
クックすると検索条件が表示されます。

検索結果が表示されます。

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

複数の検索結果を掛け合わせて検索します。“Create Combined Query”をクリックします。

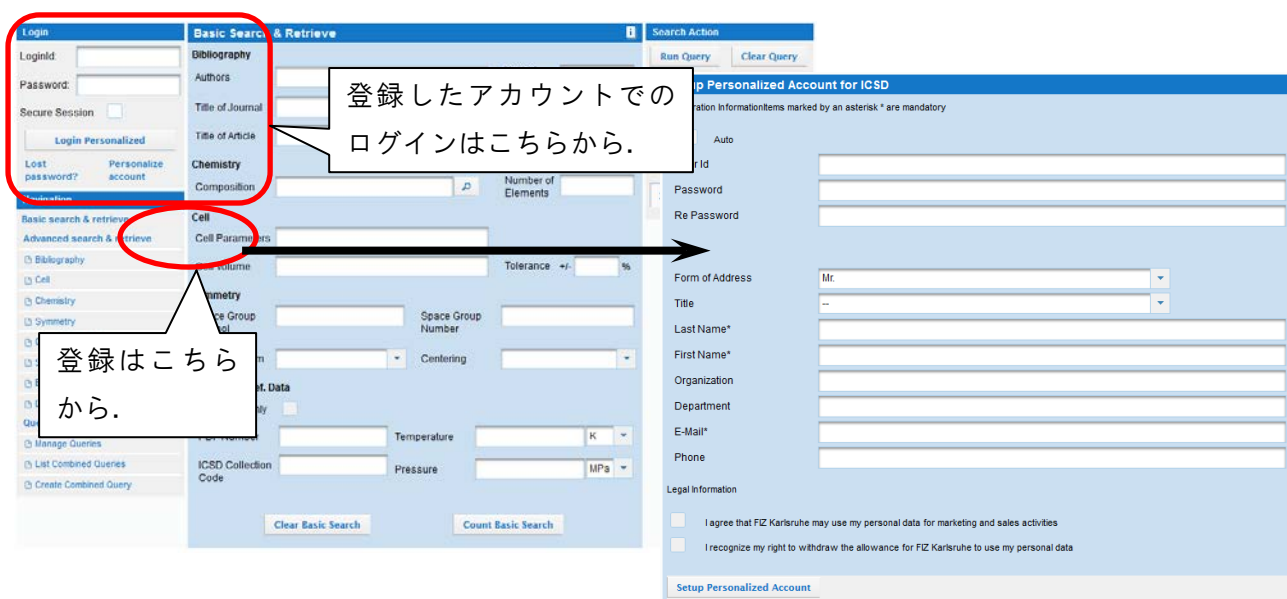
掛け合わせたい検索を選択し、AND,OR,NOT のいずれかの  をクリックします。“Run Query”をクリックして、掛け合せ検索をします。検索結果の閲覧やデータの出力は、3.を参照ください。



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、一旦ログアウトし再びログインしても、過去の検索条件や検索結果を参照できます(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ログインした場合も検索履歴は一時的に保存されますが、一度ログアウトすると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。作成した個人用アカウントでログインする場合、1.で ICSD Web に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。



以上