

ICSD-Desktop / ICSD Web 基本ガイド

(Ver. 2.3, August 2020)

ICSD Web の画面を使用。画面や機能は 2020 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	3
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
3-3. 個別に CIF 形式で出力する	6
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
6-1. “Manage Query”で Query の整理を行う	8
6-2. “Create Combined Query”で掛合せを決定する	9
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。


ご質問や問題点を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/>

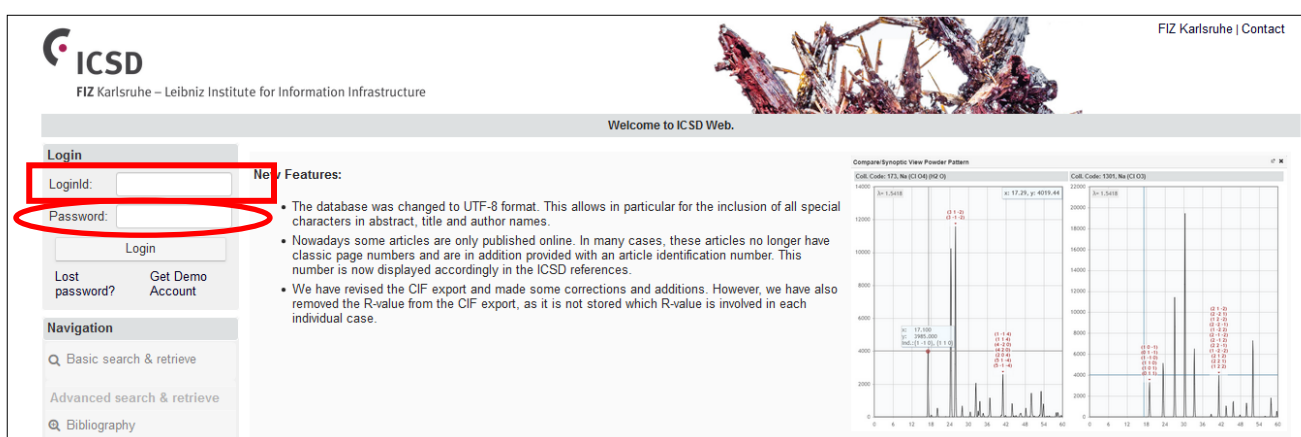
1. ICSD-Desktop を起動する / ICSD Web へログインする

(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

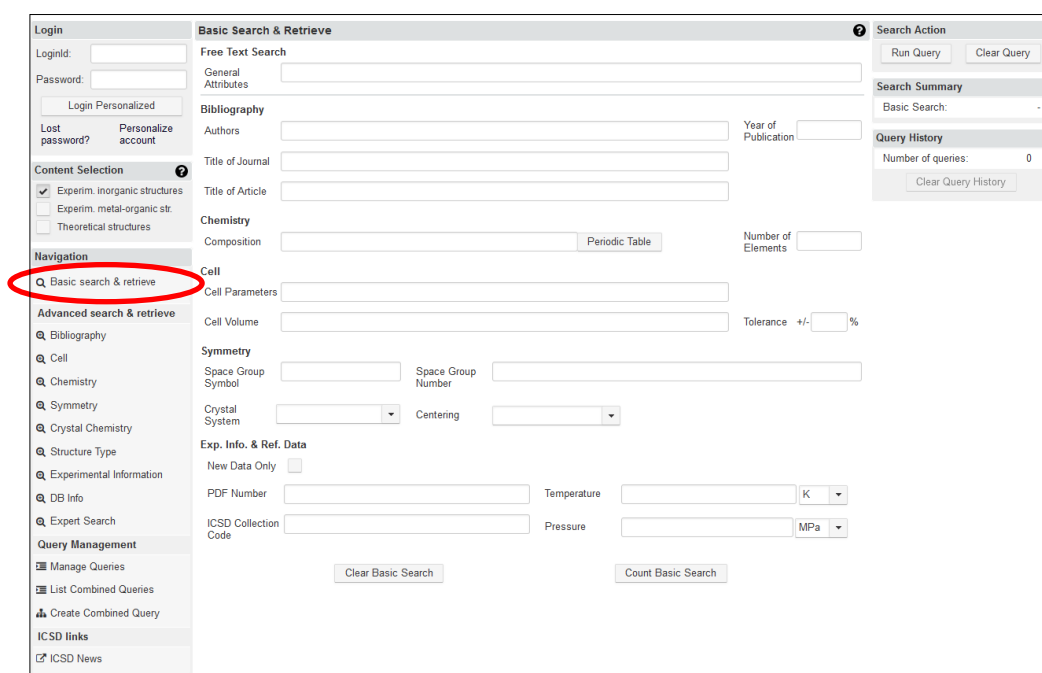
ICSD Web のページ (<https://icsd.fiz-karlsruhe.de/>) へアクセスします。IP アドレスを登録している場合、自動認証され、ICSD Web へログインします。ID/Password でログインする場合は、ログイン ID とパスワードを、それぞれ”LoginId”と”Password”に記入し、”Login”をクリックします。



The screenshot shows the ICSD Web interface. On the left, there is a 'Login' section with input fields for 'LoginId:' and 'Password:'. A red box highlights these fields. Below the login fields are links for 'Lost password?' and 'Get Demo Account'. To the right of the login form is a 'New Features:' section with several bullet points. Further right is a 'Compare Synoptic View Powder Pattern' graph showing two XRD patterns with their respective CIF codes and parameters.

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。）



The screenshot shows the ICSD Web search interface. The 'Basic Search & Retrieve' section is highlighted with a red box. The interface includes a search form with various filters like 'Free Text Search', 'Bibliography', 'Chemistry', 'Cell', 'Symmetry', and 'Exp. Info. & Ref. Data'. There are also buttons for 'Run Query', 'Clear Query', 'Clear Basic Search', and 'Count Basic Search'.

検索条件は手入力または、選択肢から選択できます。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。

初期設定は「実験によって得られた無機化合物」のみだが、「実験によって得られた有機金属化合物」、「理論計算によって得られた構造」も選択可能。

The screenshot shows the ICSD search interface with several callouts:

- Content Selection:** A red box highlights the 'Content Selection' section with a question mark icon. It contains three options: 'Experim. inorganic structures' (checked), 'Experim. metal-organic str.', and 'Theoretical structures'.
- Search Action:** A red circle highlights the 'Search Action' section with a question mark icon. It contains 'Run Query' and 'Clear Query' buttons.
- Search Results:** A red box highlights a list of search results for 'Acta'. The results include: 'Theoretica Chimica Acta', 'Acta Chimica Academiae Scientiarum Hungaricae', 'Acta Physica Sinica (Overseas Edition)', 'Acta Chimica Sinica (English Edition)', 'Nova Acta Regiae Societatis Scientiarum Upsaliensis', and 'Microchimica Acta'.
- PDF Number:** A red dashed circle highlights the 'PDF Number' field in the 'Exp. Info. & Ref. Data' section.
- Temperature:** A red dashed circle highlights the 'Temperature' field in the 'Exp. Info. & Ref. Data' section.
- Search Action Callout:** A text box says: '?マークをクリックすると、それぞれの検索条件の説明と入力例が表示。' (Clicking the ? mark displays the explanation and input examples for each search condition.)
- Text Search Callout:** A text box says: '文字による検索では、ワイルドカード (*) も使用可能。' (In text-based search, wildcards (*) are also usable.)
- Numeric Search Callout:** A text box says: '数値検索の項目には, >, >=, <, <= を使用可能。' (In numeric search items, >, >=, <, <= are usable.)
- PDF Number Callout:** A text box says: 'ICDD の PDF 番号からも検索可能。' (Search is also possible from ICDD's PDF numbers.)

また、Composition の右横の"Periodic Table"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。

The screenshot shows the ICSD search interface with the 'Periodic Table' button highlighted in a red dashed circle. A 'Search Chemistry Visual Search mode' window is open, showing a periodic table with elements highlighted in blue. The 'Run Query' button in the top right is also highlighted in a red circle.

AND, OR, NOT 検索が可能. AND 検索は元素をそのまま続けて記入, OR 検索は(), NOT 検索は「-」を使用。
(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
*原子間にはスペースを入れること。

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。

The screenshot shows the 'Results: List View' interface. At the top, there are buttons for 'Back to Query', 'Show Detailed View', 'Export Data', 'Print', 'Compare Structures', and 'Compare Powder Pattern'. On the right, there are 'Column Selection' and 'Filter' options. The main table has columns: Coll. Code, HMS, Struct. Form., Struct. Type, Title, Authors, Reference, Cell Paramet, Standardised, ANX-Formula, AB-Formula, Publication Y, and a star icon. The first few rows of the table are visible, with the first row highlighted in blue. At the bottom, there is a pagination control showing '(1 of 41)' and a dropdown menu for the number of items per page, currently set to 10.

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。

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すべてのレコードを選択することが可能。

The screenshot shows the same search results page as above, but with two records (46 and 393) selected, indicated by checkmarks in the leftmost column. The top navigation buttons are highlighted with a red box. The pagination control at the bottom shows '(1 of 41)' and a dropdown menu for the number of items per page, currently set to 10.

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

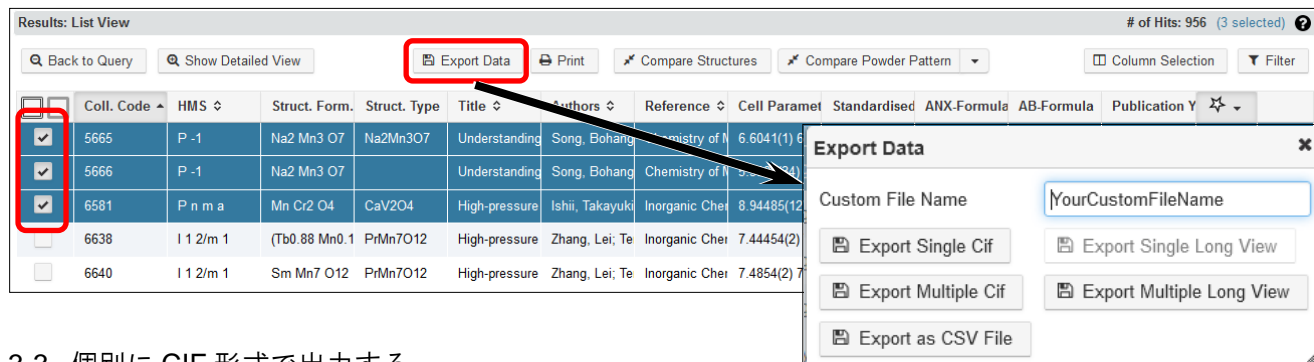
選択したレコードについて、構造データの詳細が表示されます。左上の"Back to Query"をクリックすると検索条件の設定画面へ、"Back to List"で検索結果画面へ戻ります。

(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。

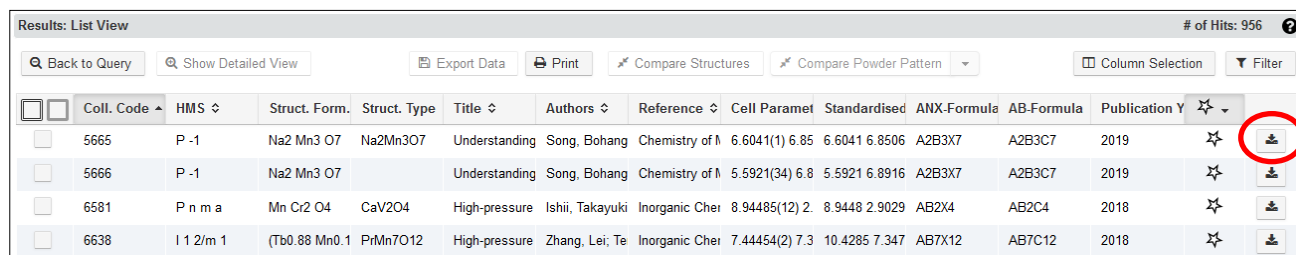
(3) **Export Data と Report** : 選択したレコードを CIF, CSV, TXT file で出力します。

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。

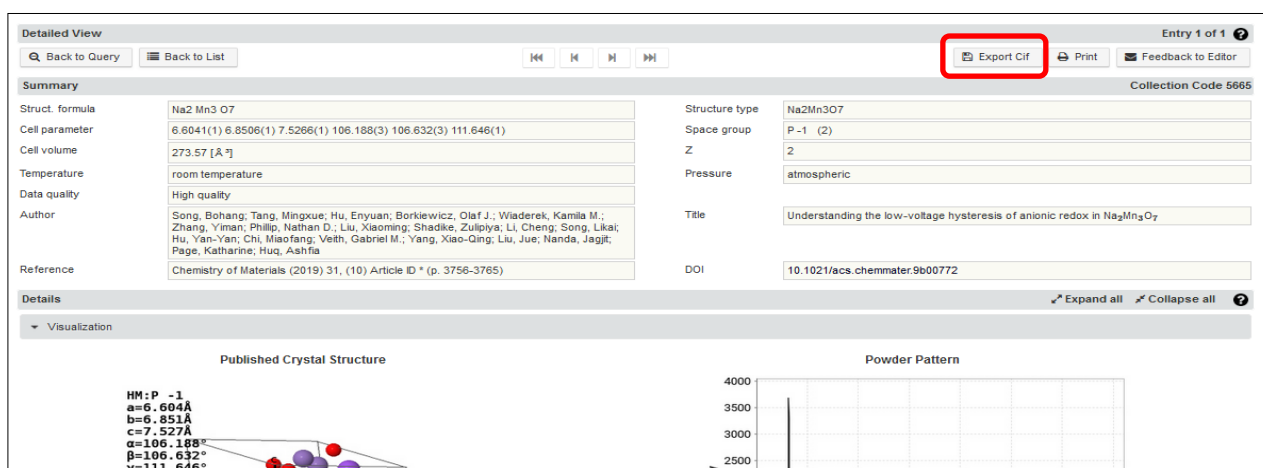


3-3. 個別に CIF 形式で出力する

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。

Query History	Number of queries
2020-07-31T04:40	956
2020-07-31T02:58	956

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 'Basic Search & Retrieve' page. On the left sidebar, under 'Query Management', the 'Manage Queries' option is highlighted with a red box. The main content area shows various search filters like 'Free Text Search', 'Bibliography', 'Chemistry', 'Cell', 'Symmetry', etc. On the right, there is a 'Search Action' panel with 'Run Query' and 'Clear Query' buttons, and a 'Query History' table.

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

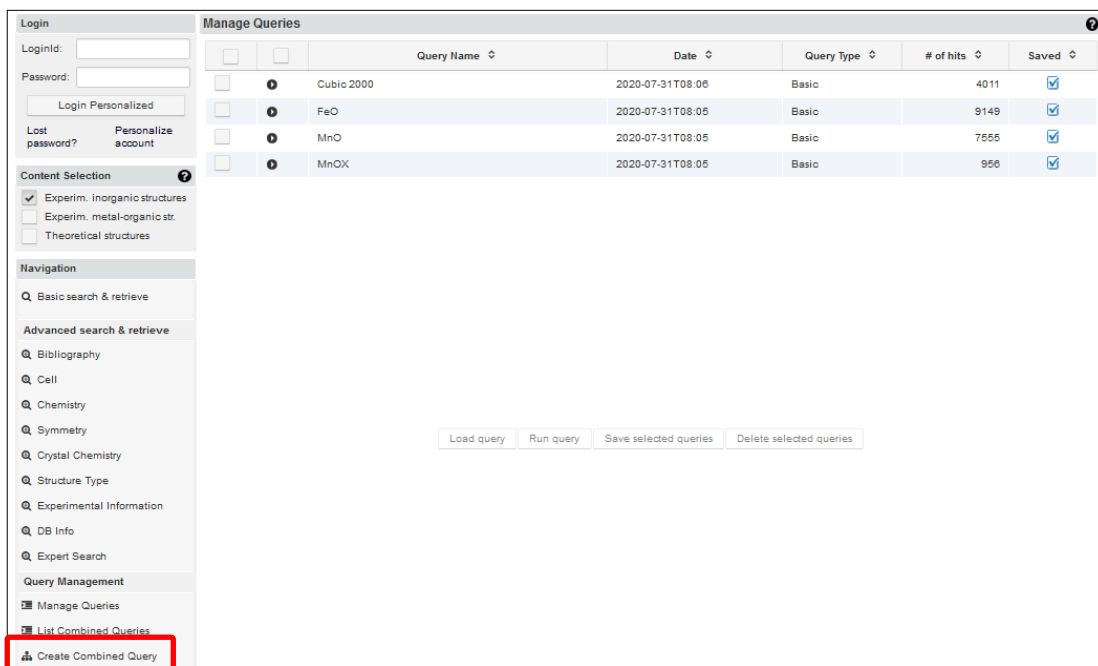
The screenshot shows the 'Manage Queries' page with a table of saved queries. The table has columns for 'Query Name', 'Date', 'Query Type', '# of hits', and 'Saved'. A red circle highlights the 'Query Name' column header.

Query Name	Date	Query Type	# of hits	Saved
2020-07-31T08:06	2020-07-31T08:06	Basic	4011	
2020-07-31T08:05	2020-07-31T08:05	Basic	9149	
2020-07-31T08:05	2020-07-31T08:05	Basic	7555	
2020-07-31T08:05	2020-07-31T08:05	Basic	956	
2020-07-31T08:05	2020-07-31T08:05	Basic	71	

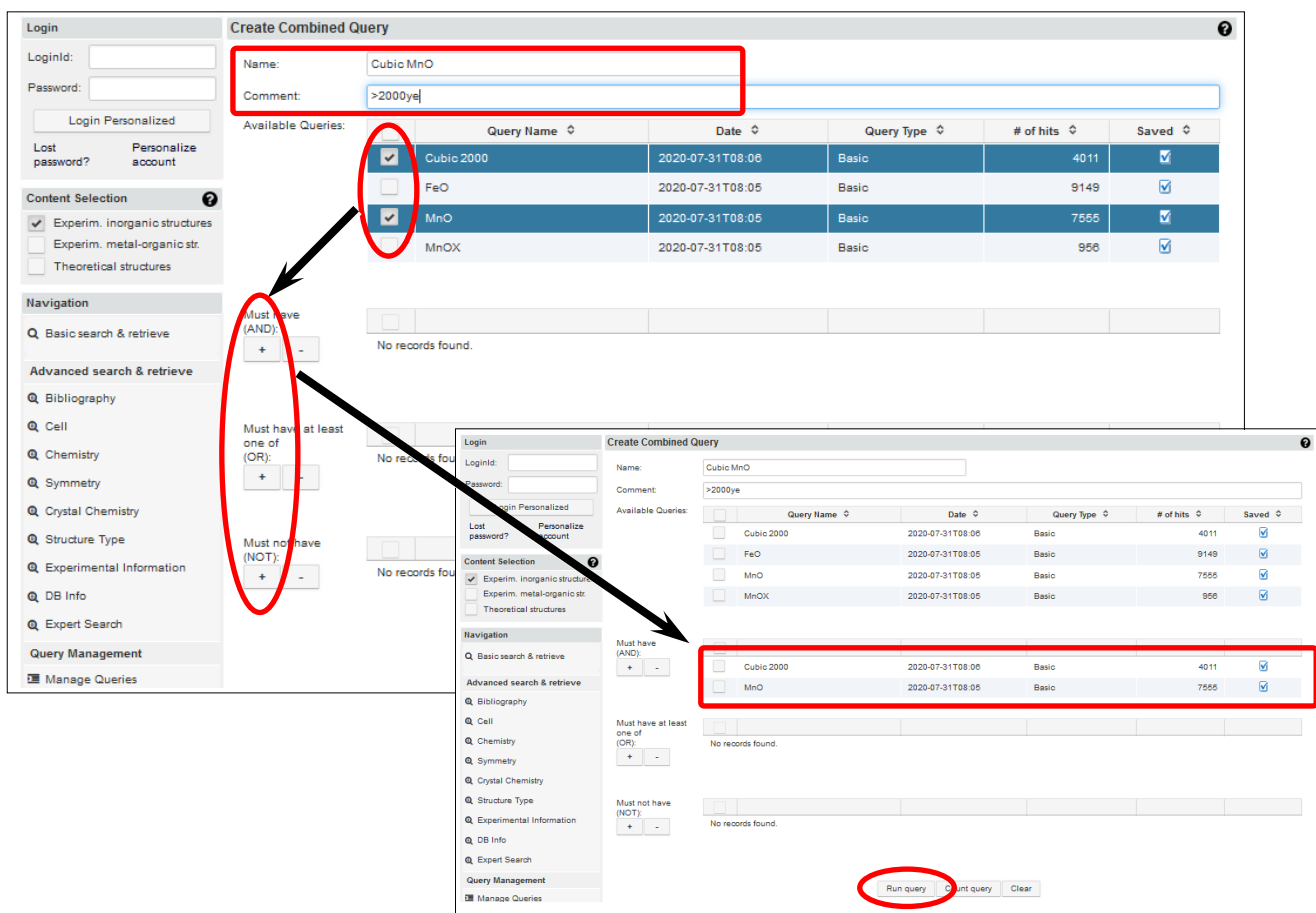
各 Query の Query Name の変更や Comment の付与が可能です。記入が終わったら、チェックボックスにチェックを入れ, “Save selected queries”をクリックして保存します。

The screenshot shows the 'Manage Queries' page with annotations. A red box highlights the 'Query Name' field, and another red box highlights the 'Comment' field. A red circle highlights the 'Save selected queries' button. Callout boxes provide instructions: ❶ 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. ❷ 変更を保存したい Query にチェック. ❸ クリックすると保存完了.

6-2. “Create Combined Query”で掛け合せを決定する
まず, “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. 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.



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。

The screenshot shows the ICSD Web interface. On the left, there is a navigation menu with options like "Basic search & retrieve", "Advanced search & retrieve", "Bibliography", "Cell", "Chemistry", and "Symmetry". In the main area, there are several input fields for search criteria. A red box highlights the "Login" section, which includes fields for "LoginId:" and "Password:", and a "Login Personalized" button. A callout box points to this section with the text "登録したアカウントでのログインはこちらから。". Another red box highlights the "Personalize account" button, with a callout box pointing to it that says "登録はこちらから。".

The screenshot shows the "Setup Personalized Account for ICSD" registration form. It includes fields for "Login ID", "Password", and "Re Password". Below these, there are fields for "Form of Address" (with a dropdown menu), "Title" (with a dropdown menu), "Last Name*", "First Name*", "Organization", "Department", "E-Mail*", and "Phone". At the bottom, there are two checkboxes for "Legal Information": "I agree that FZ Karlsruhe may use my personal data for marketing and sales activities" and "I recognize my right to withdraw the allowance for FZ Karlsruhe to use my personal data". A red circle highlights the "Setup Personalized Account" button at the bottom right. A callout box points to this button with the text "必要事項を記入して 'Setup Personalized Account' をクリック。".

以上