

目次

1. Overview.....	1
1.1. License.....	1
1.2. 必要/推奨動作環境.....	1
1.3. データベースの利用について.....	1
2. Main window.....	1
2.1. File menu.....	1
2.2. 結晶リスト.....	2
2.3. 結晶情報.....	2
2.4. 検索機能.....	3

1. Overview

CSManager は、American mineralogist crystal database (AMCSD)や Crystal Open Database (COD)が提供する結晶構造を検索、変換、出力するソフトウェアです。ご意見やご要望はメール (seto.y@omu.ac.jp) あるいは GitHub の Issue (<https://github.com/seto77/CSManager/issues>) でお知らせ下さい。

1.1. License

本ソフトウェアは MIT ライセンスの下で配布しています (<https://github.com/seto77/CSManager/blob/master/LICENSE.md>)。下記の条件を受け入れていただけるのであれば、誰でも自由に無料で、このソフトウェアを使っていただくことができます。

- このソフトウェアをコピーして使ったり、配布したり、変更を加えたり、変更を加えたものを配布したり、商用利用したり、有料で販売したり、なんにでも自由につかってください。
- ただし、再配布する場合は、このソフトウェアの著作権とこのライセンスの全文を、ソースコードの中やソースコードに同梱したライセンス表示用の別ファイルなどに掲載してください。
- このソフトウェアにはなんの保証もついていません。たとえ、このソフトウェアを利用したことで何か問題が起きたとしても、作者は如何なる責任も負いません。

1.2. 必要/推奨動作環境

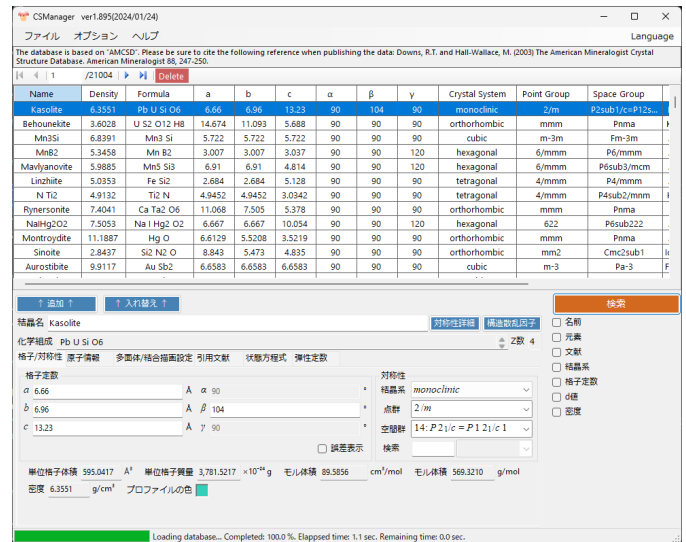
CSManager が動作するための必要環境は、

- .Net Desktop Runtime 8 以上が動作する Windows OS
- です。.Net Desktop Runtime 8 は、[こちら](#)のページからインストールすることが出来ます。

1.3. データベースの利用について

AMCSD に含まれる結晶構造データを用いて、オンライン/オフライン問わず学術論文などの出版をする場合は、必ず以下の論文を引用してください。Downs, R.T. and Hall-Wallace, M. (2003) The American Mineralogist Crystal Structure Database. American Mineralogist 88, 247-250.

2. Main window

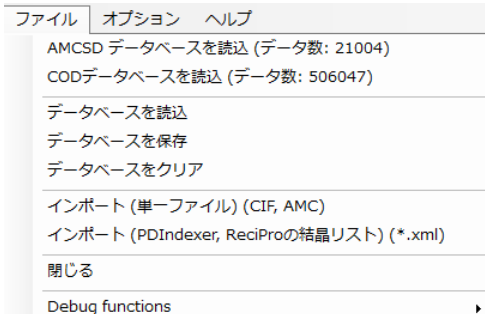


CSManager が正常に起動すると、上のようなウィンドウが表示されます。このウィンドウは大きく分けて

- ファイルメニュー (最上部)
- 結晶データ (中央部)
- 結晶情報 (下部)
- 検索機能 (下部右側)

から構成されています。以下に詳細を説明します。

2.1. File menu



ファイル

AMCSD データベースを読み込む

アメリカ鉱物学会(MSA)が提供する AMCSD データベースを読み込みます。このデータベースは約 2 万件の結晶構造を含んでいます。インストールファイルにバンドルされているため別途ダウンロードする必要はありません。また、オプションで「起動時に AMCSD を自動で読み込む」がチェックされている場合は、このメニューを手動で実行する必要はありません。

COD データベースを読み込む

Crystal Open Database (以降 COD)が提供する結晶データベースを読み込みます。COD は 50 万を超える結晶構造が含まれており、ファイル容量が巨大(>800 MB)なため、インストールファイルにはバンドルされていません。初回読み込み時は、インターネットから自動で COD データファイルをダウンロードします。二回目以降のはダウンロード済みのファイルを読み込みます。

データベースを読み込み

任意のデータベース(*.cdb3)を読み込みます。AMCSD が COD を使うだけでしたら、このメニューを使う機会はないでしょう。

データベースを保存

任意のデータベース(*.cdb3)を保存します。AMCSD が COD を使うだけでしたら、このメニューを使う機会はないでしょう。

データベースをクリア

データベースをクリアします。データベースファイルが消えるわけではなく、読み込まれているデータをクリアするだけです。

インポート (単一ファイル)

CIF ファイルや AMC ファイルを読み込みます。読み込まれた結晶構造は、現在のデータベースの最後に追加されます。

インポート (PDIndexer や ReciPro の結晶リスト)

拙作ソフト PDIndexer や ReciPro の結晶リストをインポートし、現在のデータベースの最後に追加します。

閉じる

アプリケーションを終了します。

オプション

オプション	ヘルプ
<input checked="" type="checkbox"/> ツールチップを表示	
<input checked="" type="checkbox"/> 起動時に AMCSD データベースを自動で読み込む	
Incremental Search	
Font Size in Data Table	

ツールチップを表示

チェックするとツールチップを表示します。

起動時に AMCSD データベースを自動で読み込む

読んで字のごとくです。デフォルトでチェックされています。チェックされている場合は、起動と同時に AMCSD データベースを読み込みます。

Incremental Search

チェックされている場合、検索テキストなどを変更したら即座に検索結果に反映されます。

Font Size in Data Table

結晶データの文字サイズを変更します。

Help

ヘルプ
Program Updates
ヒント
Version History
License
WEBマニュアル

アップデート

新しいバージョンがリリースされているかをチェックし、リリースされている場合はアップデートを行います。

ヒント

Deprecated.

バージョン履歴

バージョン履歴を表示します。

ライセンス

ライセンスを表示します。

Github ページ

Github に公開している CSManager のリポジトリトップページを表示します。

バグ・要望報告



Github の Issue ページを表示します。

使い方 (PDF)

このページを表示します。

Language

言語を切り替えます。現在は英語と日本語のみ対応しています。切り替え後は、再起動が必要です。

Language
 English
 Japanese

2.2. 結晶リスト

Name	Density	Formula	a	b	c	α	β	γ	Crystal System	Point Group	Space Group
Kaolinite	2.58	Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	0.357	0.515	0.891	90	90	90	monoclinic	2/m	P2 ₁ /c
Bechouite	3.6028	U ₂ O ₇ ·12H ₂ O	14.674	11.093	5.688	90	90	90	orthorhombic	mmm	Pnma
MnSi	4.8991	MnSi	0.357	0.515	0.891	90	90	90	cubic	m-3m	Fm-3m
MnSi	5.3458	MnSi	0.357	0.515	0.891	90	90	90	hexagonal	6/mmm	P6 ₃ /mmc
Malyanovite	5.9885	MnSi	0.357	0.515	0.891	90	90	90	hexagonal	6/mmm	P6 ₃ /mmc
Lazurite	5.0333	Fe ₂ Si ₂	2.684	2.684	5.128	90	90	90	tetragonal	4/mmm	P4/mmm
NiTi ₂	4.9132	Ti ₂ Ni	4.9452	4.9452	3.0342	90	90	90	tetragonal	4/mmm	P4 ₂ mb2/mmm
Rymondite	7.4041	CaTi ₂ O ₆	1.008	7.505	5.378	90	90	90	orthorhombic	mmm	Pnma
Nahcolite	7.5053	NaHCO ₃	0.357	0.515	0.891	90	90	90	hexagonal	6/mmm	P6 ₃ /mmc
Montroydite	11.1887	Hg ₂ O	6.6129	5.5208	3.5219	90	90	90	orthorhombic	mmm	Pnma
Sinohite	2.8437	Si ₂ N ₂ O	8.843	5.473	4.835	90	90	90	orthorhombic	mm2	Cmc2ab1
Auriferite	8.9117	Au ₂ Si ₂	6.6983	6.6983	6.6983	90	90	90	cubic	m-3	Pm-3

データベースが読み込まれると、ウィンドウの中央部には上記のようなリストが表示されます。

選択

結晶を選択すると、その結晶の詳細情報がウィンドウ下部に表示されます。もし、拙作ソフトウェア ReciPro や PDIndexer が起動している場合は、選択と同時に、その結晶の情報がクリップボード経由でそれらのソフトウェアに転送されます。

並び替え

各列の最上部をクリックすると、対象項目を昇順/降順で並べ替えることが出来ます。

2.3. 結晶情報

結晶情報		
結晶名 Au	対称性詳細 構造乱因子	
化学組成 Au	Z数 4	
格子/対称性 原子情報 参考文献 状態方程式 弾性定数		
格子定数	対称性	
a 4.07825 Å	α 90°	結晶系 cubic
b 4.07825 Å	β 90°	点群 $m\bar{3}m$
c 4.07825 Å	γ 90°	空間群 $225:Fm\bar{3}m$
<input type="checkbox"/> 誤差表示 検索		
単位格子体積 67.8300 Å ³	単位格子質量 1,308.2834 ×10 ⁻²⁴ g	モル体積 10.2120 cm ³ /mol
モル体積 196.9665 g/mol	密度 19.2877 g/cm ³	プロファイルの色

結晶の格子定数/対称性/原子位置などを設定/表示します。この部分に CIF ファイルや AMC ファイルをドラッグドロップして任意の結晶を読み込むことも出来ます。

結晶に何らかの変更を加えた場合は、必ず“Add”あるいは“Replace”ボタンを押してください。押さなかった場合その情報は結晶リスト中に保存されず、変更内容は失われてしまいます。

この項目の説明は長いので、[別のページ](#)で詳しく説明しま

す。

2.4. 検索機能

The screenshot shows a search interface with the following sections:

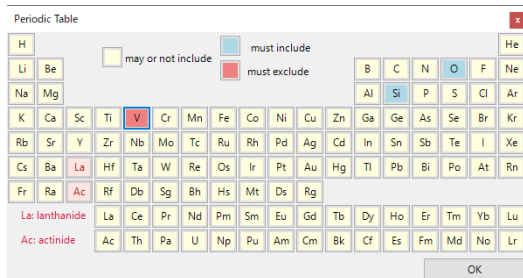
- 検索** (Search) button at the top.
- 名前** (Name): Input field.
- 元素** (Element): Input field with a "周期表" (Periodic Table) button.
- 文献** (Literature): Input field.
- 結晶系** (Crystal System): Dropdown menu.
- 格子定数** (Lattice Constant): Input fields for a, b, c and angles α , β , γ , with tolerance ranges.
- d値** (d-value): Input fields for d-spacing and tolerance ranges, with a checkbox for "散乱因子を無視" (Ignore structure factor).
- 密度** (Density): Input field for density and tolerance range.

検索条件を入力します。入力した後は「検索」ボタンあるいはエンターキーを押してください。

名前

検索したい結晶の名称を入力します。

元素



「周期表」ボタンを押すと、別ウィンドウが立ち上がります。ここで検索対象の元素を選択します。各元素のボタンは押すごとに状態が切り替わります。

ウィンドウ上部の "may or not include", "must include", "must exclude" ボタンを押すと、全元素の状態を切り替えることができます。

文献

検索したい結晶の文献情報（論文名、雑誌名、著者名など）を入力します。

結晶系

検索したい結晶の結晶系を入力します。

格子定数

検索したい結晶の格子定数と許容する範囲を入力します。ゼロと入力した場合は、その項目は無視されます。

d 値

結晶面の d-spacing と許容する範囲を入力します。指定した範囲に含まれる d-spacing を持つ結晶が検索されます。「散乱因子を無視」がチェックされている場合は、回折強度（結晶構造因子）を考慮せず、たとえ消滅側に抵触する結晶面であっても、検索を行います。「散乱因子を無

視」がチェックされていない場合は、結晶構造因子を考慮し、強度の上位 20 までの結晶面についてだけ検索を行います。

密度

検索したい結晶の密度と許容する範囲を入力します。