CSManager Manual

Copyright© Yusuke SETO

目次

[1. Overview 1](#_Toc155648176)

[1.1. License 1](#_Toc155648177)

[1.2. 必要/推奨動作環境 1](#_Toc155648178)

[1.3. データベースの利用について 1](#_Toc155648179)

[2. Main window 1](#_Toc155648180)

[2.1. File menu 1](#_Toc155648181)

[2.2. 結晶リスト 2](#_Toc155648182)

[2.3. 結晶情報 2](#_Toc155648183)

[2.4. 検索機能 3](#_Toc155648184)

# 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こったとしても、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](https://dotnet.microsoft.com/ja-jp/download/dotnet/8.0)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.

# グラフィカル ユーザー インターフェイス, アプリケーション, テーブル 自動的に生成された説明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。

## 文字の書かれた紙 中程度の精度で自動的に生成された説明2.1. File menu

### ファイル

#### AMCSDデータベースを読込

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データベースを読込

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かCODを使うだけでしたら、このメニューを使う機会は無いでしょう。

#### 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かCODを使うだけでしたら、このメニューを使う機会は無いでしょう。

#### 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。

### テキスト, 手紙 自動的に生成された説明オプション

#### 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。

### グラフィカル ユーザー インターフェイス, テキスト, アプリケーション 自動的に生成された説明Help

#### 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。

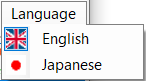
#### バグ・要望報告

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。

## グラフィカル ユーザー インターフェイス, アプリケーション, テーブル 自動的に生成された説明2.2. 結晶リスト

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](CrystalInformationManual(ja).pdf)で詳しく説明します。

## グラフィカル ユーザー インターフェイス, アプリケーション 自動的に生成された説明2.4. 検索機能

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。

### パソコンの画面 中程度の精度で自動的に生成された説明元素

「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出来ます。

### 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。