

文件上传指南

当您准备上传 CIF 文件时请尽可能提供详细的信息并仔细检查，这对于没有具体论文阐述化合物性质及实验细节的 CSD 通讯投稿尤其重要。如果您选择以 CSD 通讯的形式发表您的数据请务必将所有对此晶体结构做出过贡献的作者、晶体学家、化学家等相关人员列为这个数据的作者。如果无法通过您提供的信息验证该结构，我们或将联系您以取得跟多的信息。如果我们无法解决结构数据中存在的问题，那么，很抱歉我们将无法将您的结构添加到 CSD 中去。

所有实验性的 CIF 文件（包括通过粉末衍射实验得到）应包含可靠性指数 R 因子。这一因子应该在正确运用结晶学原理的基础上，与所使用的材料和设备所期望的最佳功效保持一致。

一个 CIF 文件对应一个晶体结构，并且应该包含下列信息：

- 可靠性指数 R 因子 (R1, wR2, Rint)
- GooF
- Shift/ESD (以显示精修已经汇总)
- 对实验中出现问题给予解释，特别是那些与衍射点数量和参数相关的问题
- 任何残留的电子密度
- 运用 SQUEEZE 或者 MASK 处理无序的溶剂和其他残留电子密度的细节
- Atomic Displacement Parameter (ADP)值。
- 温度-采集整套数据的温度
- 实验装置包括安装装置和仪器类型
- HKL 文件需要包含在内
- RES 文件需要包含在内

我们鼓励您充分利用在上传数据时产生的 IUCr CIF 检查报告，这一报告会高亮显示结构中出现的**问题**，尤其对于 A 级和 B 级的警告，您可以在验证回复表中对这些问题做出解释。理想情况下，您应清晰解释对无序或只是部分存在的原子的处理过程，最重要的是确保没有 **nonpositive definite** 原子!

为确保我们对您的结构进行最精确的描述，请您在“强化数据”页面提供详尽的补充信息。将信息录入到 CSD 中时我们最常会遇到的一些化学类的问题，包括：

Cif 文件中列出的分子式与根据晶体结构计算出的分子式不匹配。特别需要注意实验中无

法定位的氢原子。一个完整的单体分子式（包含所有氢原子及使用 SQUEEZE/MASK 屏蔽了的溶剂分子）将会极大地帮助我们准确地描述您的结构。

- 结构的整体电荷要平衡，特别要注意多价态的金属氧化物和自由基
- 游离的氢原子，特别是在氧原子周围可能形成羟基（hydroxy）/氧（oxy）/水配体（aqua），或者是在多氧金属酸结构中无法准确定位的氢原子
- 不常见的化学键，互变异构体或金属-金属键
- 没有认真处理过的无序模型
- 没有经过 SQUEEZE or MASK 处理并没有任何解释的孔隙空间

有助于用户对您结构的使用，并能够正确识别与该结构相关的任何先前结构的信息，包括：

- 立体化学的测定方法
- 结晶溶剂/条件
- 晶体熔点
- 再次对结构进行精修的细节-如果一个结构是现有 CSD 中某个结构的再次精修，请务必告知我们。
- 任何已知相关结构的 refcode 或 CCDC 编号，如在不同温度/压力/立体化学/条件下测定的结构;例句如“高温下测定的 REFCODEXXXXXX”

如果您还有更多问题，请通过咨询页面联系我们。