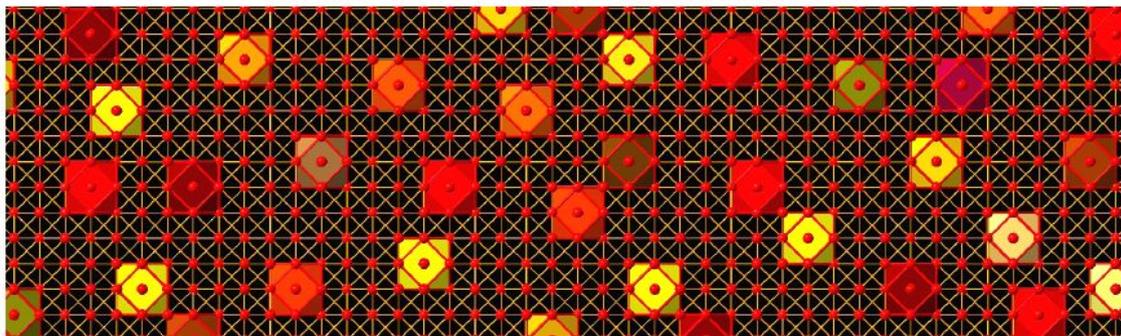


# Pearson's Crystal Data

**Crystal Structure Database for Inorganic Compounds**

**RELEASE 2008/9 • 165,000 ENTRIES**

**Pierre Villars, Karin Cenzual (editors)**



**The Materials  
Information Society**



# Inicio rápido

## Instalación

Antes de iniciar la instalación por favor compruebe los requisitos mínimos del sistema que se resumen en:

- ◆ Sistema operativo Microsoft Windows 98, ME, 2000, XP o Vista operating system
- ◆ Microsoft Internet Explorer 5.01 o superior.
- ◆ 128 mega bites de RAM (se recomiendan 256 mega bites)
- ◆ 800 mega bites libres de espacio en el disco duro.
- ◆ Tarjeta gráfica con una resolución de 1024 x 768 pixels y una profundidad de color de 32 bites.

La instalación de "**Pearson`s Crystal Data**" ("**PCD**") se realiza en dos etapas:

- ◆ Instalación del software y la base de datos (en dos CD)
- ◆ Instalación de su licencia personal (recibida desde e-mail o en un CD)

Coloque el CD de instalación ("Disk 1") en la disquetera y tras unos segundos se iniciará el auto arranque.

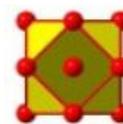


Fig. 1 - Icono de PCD

Pulse sobre el logo "Install Pearson's Crystal Data". El programa se instalará automáticamente

Tras la instalación del programa es necesario instalar su licencia personal PCD. El código de la licencia le habrá sido enviado a su correo electrónico en el momento de realizar el pedido directamente desde **ASM** internacional. Por favor salve el archivo adjunto que acompañará a ese correo en el directorio en que se instale el programa por defecto por lo general en "C:\Archivos de programa \Pearsons Crystal Data"; puede determinarse la ruta exacta mirando las propiedades del icono del programa que aparece en el escritorio.

## Nuestra primera búsqueda de datos

Tan pronto como se ha efectuado la instalación podrá comprobar la forma de trabajo de nuestro programa y su correcto funcionamiento. Supongamos que estamos interesados en el trabajo de un autor llamado "Aasen" ¿Existe información en el PCD?

Si no ha iniciado PCD hágalo con un doble clic sobre el icono del programa de su escritorio,

Tras arrancar, el programa mostrará el cuadro de diálogo de búsqueda rápida Fig. 2 ("Quick search"), en el que se muestran en distintos campos los criterios de búsqueda mas frecuentes.



Quick search

Use Ctrl key to select multiple elements to be combined with OR.  
Use right mouse button to select concentrations or oxidation numb...

1A	2A	3B	4B	5B	6B	7B	8B	8B	1B	2B	3A	4A	5A	6A	7A	8A		
1P	H															2 He		
2P	3 Li	4 Be									5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
3P	11 Na	12 Mg									13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
4P	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5P	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6P	55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
7P	87 Fr	88 Ra	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	

Element(s) 1:    3:

Element(s) 2:    4:

Number of elements:

Functional group:

Entry prototype:

Space group number (std.):

Hermann-Mauguin symbol (std.):

Crystal system (std.):

Cell length (std.) [nm], a:    b:    c:

Cell angle (std.) [°], α:    β:    γ:

Journal:    Author:

Reference:    Level of structural studies:

Show current restraints info

Field	Content	Entries
-------	---------	---------

Fig. 2 – Búsqueda rápida

Pulemos el botón de la caja de selección junto al campo “Autor”

Author:

Se desplegará una lista de todos los autores contenidos en la base (Fig. 3) y junto a sus nombres bajo el encabezamiento “Counts” aparecerá el número de trabajos relacionados en nuestra base de datos.

Author

Select one or more lines from the list below:

Author	Counts
Aasen A.	2
Abadli L.	1
Abbattista F.	1
Abdusalyamova M.N.	55
Abe S.	4
Abovyan E.S.	9
Abraham C.	2
Abrahams S.C.	3
Abrikosov N.K.	3
Abulkhaev V.D.	2
Achard J.C.	3
Achour M.	1
Adamyán V.E.	5
Adamyán V.Y.	6
Ahmed F.R.	1
Ahmed N.	1

1 data selected (total count: 2)

Fig. 3 – Lista de autores y trabajos



Para cada campo del cuadro por lo general es necesario introducir un valor numérico o un texto desde el teclado; usando las listas desplegables se consiguen dos cosas, evitar errores de sintaxis y poder realizar la selección directamente con el ratón.

Seleccionamos la línea de **Aasen A**, casualmente la primera y pulsamos OK.

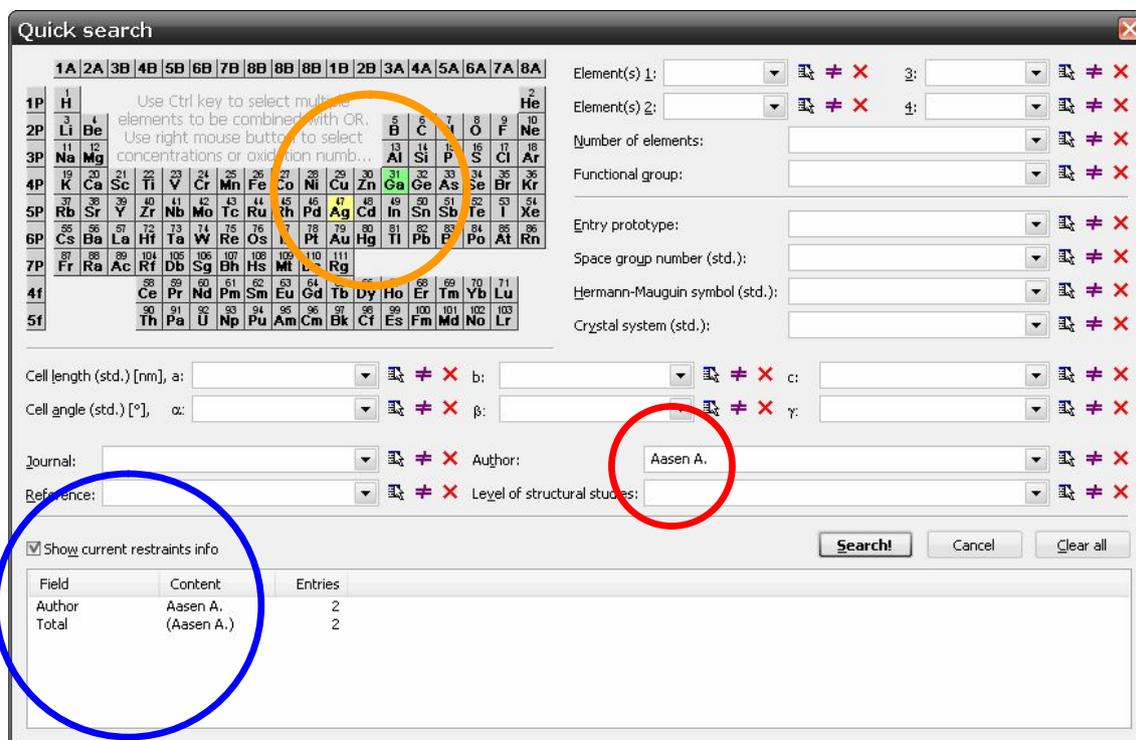


Fig. 4 – Al aceptar la restricción en el campo del autor, el cuadro muestra que existen dos trabajos en la base de datos y que se refieren a compuestos de plata y galio

El nombre del autor seleccionado aparecerá en el campo del cuadro de búsqueda circunferencia en rojo, (Fig. 4). PCD tiene un dispositivo denominado restricción perpetua “Perpetual restraining”.

Cada vez que se selecciona o se realiza una entrada en un campo del cuadro, la lista interna de de la base se actualiza inmediatamente, y en el área de información se verá reflejada esta circunstancia, en (circunferencia azul). En la tabla periódica (circunferencia naranja) se indican los elementos referidos en los trabajos del autor; en este caso son compuestos de galio y plata.

Con estos datos pulsamos el botón de búsqueda **Search**.

El informe indica que existen dos estructuras estudiadas por el autor de fórmula empírica  $Ag_2Ga$ . (Fig. 5)

Formula	Entry prototype	SGR symbol (std.)	SGR no. (std.)	a [nm]	b [nm]	c [nm]	Journal	Reference	Level struct. studies
$Ag_2Ga$	Mg <sub>2</sub> In <sub>4</sub> hP9_189	P-62m	189	0.774...	0.774...	0.287...	ZEKRDZ	(1998) 213, 639-644	complete structure de
$Ag_2Ga$	Mg <sub>2</sub> In <sub>4</sub> hP9_189	P-62m	189	0.776...	0.776...	0.287...	ZEKRDZ	(1998) 213, 639-644	complete structure de

Fig. 5 – Dos estructuras del autor Aasen A.

Al seleccionar alguna de ellas podrá verse toda la información en el cuadro, su ficha de datos, el dibujo de su estructura, el difractograma y la tabla de distancias interatómicas. (Fig. 6)

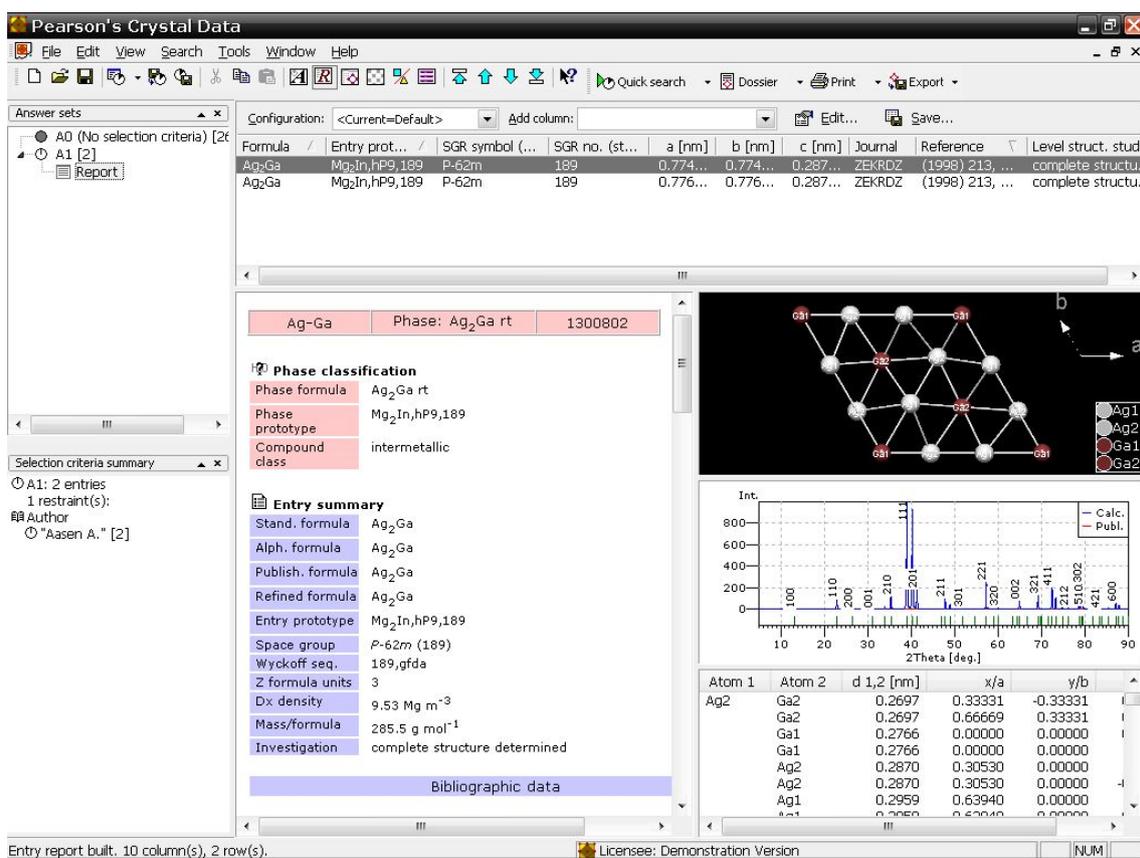


Fig. 6 – El resultado de la búsqueda mostrando las entradas posible y la ficha de la seleccionada su estructura el difractograma y la tabla de distancias interatómicas.

Desde el menú **File / Export** se puede realizar la exportación de lo resultados. (Fig 7) .

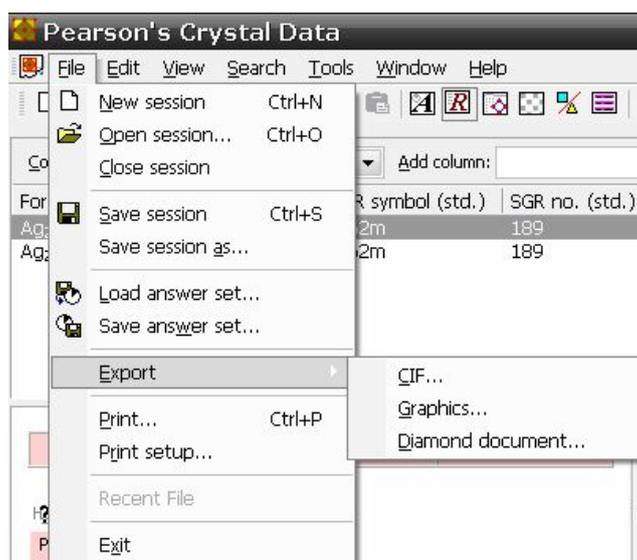
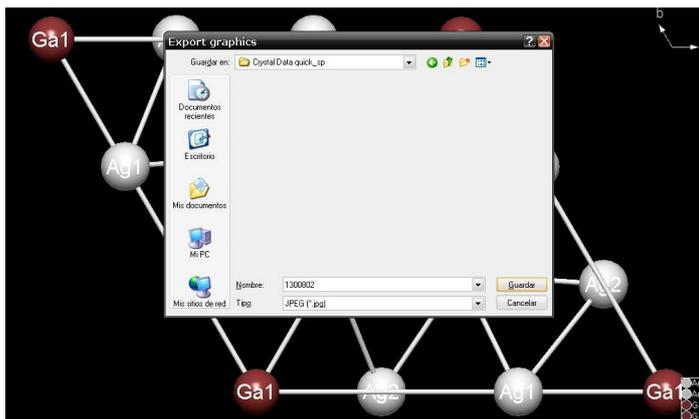


Fig. 7 – Opciones para la exportación de los datos



- Mediante **G**raphics...

Se abrirá el diálogo de Windows que permite guardar el dibujo de la estructura como un archivo .bmp o jpeg ... etc.



- Mediante **C**IF...

Podremos seleccionar la forma de guardar los datos cristalográficos de la estructura.

Estos datos pueden ser cargados, por ejemplo, por el visualizador de estructuras de Crystal Impact "Diamond" versión 3.0 o superior.



- Mediante **D**iamond document...

Podemos exportar los datos en formato **.diamdoc** compatible con el programa de visualización de estructuras *Diamond* v. 3.0 o superior de Crystal Impact

## Guía detallada

Este ejemplo es extremadamente simple y muy corto y solo sirve para demostrar las más importantes capacidades del software de búsqueda; recomendamos encarecidamente que se lea el manual adjunto accesible desde el propio programa por ejemplo seleccionándolo desde el menú "Help / Tutorial".

## Servicio

En caso de tener alguna dificultad o querer realizar alguna consulta puede hacerlo al desarrollador del software directamente a través de [pcd-support@crystalimpact.com](mailto:pcd-support@crystalimpact.com)



CRYSTAL IMPACT GbR  
Rathausgasse 30  
D-53111 Bonn  
Germany

+49 (228) 981 36 43  
+49 (228) 981 36 44  
E-mail: [pcd-support@crystalimpact.com](mailto:pcd-support@crystalimpact.com)  
<http://www.crystalimpact.com>