

ملف معلومات الكريستالوجرافية

The Crystallographic Information File (CIF)

(١٦، ١) مقدمة Introduction

ملف المعلومات الكريستالوجرافية (CIF) هو ملف حفظ لنقل بيانات بلورية: هذا التحويل قد يكون بين معامل مختلفة أو برامج حاسوب أو إلى مجلة أو قاعدة بيانات. هذا الملف هو حر التصميم، مرن ومنفذ لكي يمكن قراءته بواسطة كل من الحاسوبات والأفراد (يتطلب الأخير تدريب قليل في البداية). إن مواصفات CIF القياسية قد تم نشرها وتقدم نفس المقالة معلومات حول تطوره [1]. إنه يكون معتمداً على طريقة ملف حفظ النص المعرف ذاتياً وإمكانية الاسترداد Self-defining Text Archive and Retrieval (STAR) [2]، ويتكون من أسماء بيانات وبنود بيانات مقابلة مع وسيلة خدمية إدارية لتناول بنود مكررة مثل قائمة مؤلف/عنوان أو الإحداثيات الكسرية. يكون التصميم قابل للتوسيع بحيث إن أسماء بيانات تغطي تحسينات جديدة مثل كواشف مساحة يمكن استضافتها بسهولة. من ناحية ثانية بمجرد أن اسم بياني يكون متضمناً في القاموس المميز، فإنه لن يزال أبداً، وإلا فإن أجزاء من تلك الملفات المكتوبة في الفواصل ستكون غير معرفة.

(١٦، ٢) أساسيات Basics

CIF هو ملف ASCII بحيث تكون الحروف الآتية فقط مسموح بها كما يلي:

abcdefghijklmnopqrstuvwxyz
 ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ
 0123456789 ! @ # \$ % ^ & * () - + { } : " ~ \ | - = [] ; ' , / .

أي شيء آخر تريد أن تضيفه في النسخة المخطوطة (مثل Å، °، é، φ، الرموز السفلية والفوقية، حروف لاتينية، رموز رياضية مثل ±، ≥ أو ∞ وروابط كيميائية مضاعفة) يتطلب شفرات خاصة تكون مفصلة في *Notes for Authors for Acta Crystallographica Section C* [3]. لا تحاول أن تظهر نص مائل أو نمط ثخين أو نص به خطوط stgdm (مثل رموز زمرة فراغية) حيث أن هذه الخصائص ينبغي إضافتها أوتوماتيكياً. العديد من الأسماء البيانية لها وحدات ضمنية (مثل Å إلى طول الخلية - cell_length_a؛ Å³ إلى حجم الخلية cell_volume؛ دقائق إلى فواصل زمنية مختلفة قياسية diffn_standards_interval_time) وهذه الوحدات لا يجب أن تكون مذيّلة؛ مثلاً:

حجم الخلية cell_volume 2367.5(8)

يكون صحيحاً لكن :

حجم الخلية cell_volume 2367.5(8)%A^3

ليس صحيحاً.

لو أنك تحضر CIF الخاص بك باستخدام منسق نصوص بدلاً من محرر نص، لا بد أن تتأكد من أن مخرج الملف يكون ASCII بحيث لا توجد شفرات مطمورة (محمولة؟)

ولا تزيد السطور عن 80 حرف، لو أنك تصدر ملف ASCII من منسق نصوص فمن الأفضل أولاً أن تختار طقم كامل من حروف مطبعية كبيرة (مثل Courier بحجم 12 نقطة أو أكبر)، بحيث إن أي خطوط تكون جزء من قوالب النص لا تحتاج إلى نقل الكلمات من سطر لآخر عند التحويل. لا تدخل أي حروف غير ASCII في ملف منسق النصوص حيث أن هذه من المحتمل أن تفقد أو تتهدم أثناء كتابة ملف ASCII، وحتى لو قاومت عدم التغير فإن برنامج تشغيل CIF سوف لا يميزها بشكل صحيح.

في عام ٢٠٠١م طور مركز البيانات الكريستالوجرافية بكامبريدج (CCDC) محرر CIF حر (enCIFer)، الذي يسمح بتحرير آمن وسهل لـ CIF الناتج بواسطة برنامج تنقيح. يهدف المحرر هنا إلى أن يقدم تداخل بديهي للسماح بمعالجة CIF بدون خطر تسوية مقاطع بشكل صارم. إن التحرير الممتاز يساعد على توليد CIF بكل البيانات المطلوبة. تختار المدخلات من حيث المقاطع وتقيم قبل دخولها CIF؛ إن الملفات المعيرة يمكن أن تستخدم لتخفيض إعادة الكتابة غير الضرورية إلى الحد الأدنى. تنجز الاختبارات للتعرف على أي بنود بيانات مفقودة. يمكن لأنشطة البيانات أن تحرر عن طريق نافذة بأسلوب- لوحة النشر. لمساعدة المستخدم، تكون خدمة الاتصال بالشبكة مباشرة متاحة لبنود البيانات، يمكن مشاهدة التركيب في 3D وعلى هيئة مخطط كيميائي 2D. باستخدام نظام برنامج تصفح الانترنت يمكن تحميل عدد من CIF منفصلة (التي قد تكون قوالب شاملة، قوالب معايرة أو مخرج من برنامج تنقيح) التي يمكن تمثيلها حينئذ بواسطة أيقونات خاصة بها. إن سحب وإنزال هذه الأيقونات يسمح للقارئ أن يجمع CIFs كما هو مطلوب. إن نسخ Unix and Windows من enCIFer يمكن تحميلها مجاناً من CCDC web site (www.ccdc.cam.ac.uk).

تستخدم مصطلحات CIF الفنية الآتية:

سلسلة نص <i>text string</i>	سلسلة من حروف محددة بفراغات blanks ، بعلامات اقتباس أو بواسطة (;) مثل الحرف الأول على الخط.
مسمى بيانات <i>data name</i>	سلسلة نصية تبدأ بوضع خط أفقي تحتي (_) تحت حرف.
بند بيانات <i>data item</i>	سلسلة نصية لا تبدأ بخط أفقي تحتي لكن تكون مستهله بمسمى بيانات.
أنشطة بيانات <i>data loop</i>	قائمة بمسميات بيانات مستهله بأنشطة متبوعة بقائمة معادة من بنود بيانات.
كتلة بيانات <i>data block</i>	تجمع من مسميات بيانات وبنود بيانات (التي ربما تكون Hka,'dm) مستهله بعرض شفرة بيانات-ومنهية- بعرض-بيانات أخرى أو نهاية الملف. قد يقع مسمى بيانات مرة واحدة فقط خلال أي كتلة بيانات واحدة.
ملف بيانات <i>data file</i>	تجمع كتل بيانات: قد لا تكون لكودي كتلتين من البيانات نفس الاسم.

إن لكودي مسمى بيانات وكتلة بيانات من CIF تعريفات تكون محددة بعدد 76 حرف كحد أقصى، لكن إنشائها بتسلسل هرمي وتصميمها بعناية يعني أنها تكون مفسرة بشكل كبير مثل: `_publ_author_name` ، `_exptl_crystal_colour` ، `_computing_structure_solution`.

إن مصطلح CIF قد اكتسب عدداً من التفسيرات العامة: إنه يستخدم لوصف التصميم، مخرج البيانات ببرنامج تحكم أو تنقيح وأيضاً ملف بيانات (مكوّن من كتلتي بيانات أو أكثر) مرسله كمخطوط كتابي للنشر الإلكتروني.

Uses of CIF (CIF) استخدامات (١٦،٣)

(أ) ملف حفظ محلي خاص بك. يمكن لـ CIF المنتج بواسطة برنامج تنقيح عند تقارب التركيب الخاص بك أن يحرر ويزداد بحيث يمكن تخزين كل النتائج المناسبة وتفاصيل العمليات. كما في الاستخدامات الأخرى، سوف تعتمد درجة التحرير اليدوي المطلوبة على المدى الذي بواسطته تنتج جمع البيانات وبرامج الاختزال الخاصة بك نتاج مناسب في تصميم CIF.

(ب) طريقة قياسية لنقل بيانات بين برامج كريستالوجرافية (يقرأ عدد كبير منها ملفات بتصميم CIF) أو إلى زملاء في معامل أخرى.

(ج) طريقة فعالة لتقديم بيانات إضافية للأوراق البحثية المحتوية على تحديدات تركيب بلوري.

(د) طريقة قياسية للإيداع داخل قاعدة بيانات تركيبية.

(هـ) طريقة لجداول مطبوعة قياسية (مثل بواسطة SHELXL برنامج مساعد

.CIFTAB).

(و) طريقة إرسال إلكترونية مباشرة لمخطوط كتابي للنشر في مجلة مثل Acta Crystallographica أو Zeitschrift für Kristallographie. سوف يتكون ملف البيانات المطلوبة من عدد من كتل بيانية. إحداها، ربما تسمى بيانات-شاملة data_global واحتمال أن تكون محضرة بالتحريير اليدوي لقالب معياري سوف يحتوي على معلومات اتصال مؤلف، معلومات إرسال للنشر وقائمة مؤلف/ اسم المؤسسة/عنوان، عنوان البحث، موجز، مستخلص، مقطع تعليق (مناقشة)، تفاصيل عملية، مراجع، عناوين أشكال وشكر. هذه الكتلة سوف تكون متبوعة بكتلة بيانات لكل تركيب لكي يتم تضمينها، ربما تسمى بيانات- مركب 1، بيانات- مركب 2، إلخ.

Some properties of the CIF format CIF (١٦, ٤) بعض خواص تصميم

(أ) خلال أي كتلة بيانات، يكون تنسيق الأزواج المتشاركة من مسميات بيانات وبنود بيانات غير مهمة، حيث أن اكتمال الملف لا يعتمد على إيجاد هذه في ترتيب معين. رغم هذا فإن القراء سوف يكون من الأسهل عليهم أن يقرؤا CIF لو أن هذه رتب منطقيًا. أكثر من هذا لا توجد قيود على تنسيق كتل بيانات.

(ب) لا بد لكل مسمى بيانات أن يكون له بند بيانات مقابل، لكن لا يحتاج الأخير أن يكون محتويًا على معلومات حقيقية. في بعض الأحيان تستخدم بعض العلامات المكانية مثل '?'، أو '.'، كما في `_chemical_name_comm?`.

تكون هذه العلامات المكانية مستخدمة من خلال تراكيب أنشوية (متكررة) عندما لا تكون بعض بنود بيانات وثيقة الصلة لكل خط من الأنشطة. في المثال التالي يطبق مسمى البيانات الرابع في الأنشطة فقط في السطر الثاني من بنود البيانات الأنشوية `looped data items`.

```
loop_
-geom_bond_atom_site_label_1
-geom_bond_atom_site_label_2
-geom_bond_distance
-geom_bond_site_symmetry_2
-geom_bond_publ_flag
Ni N1 2.036(2) . Yes
Ni N1 2.054(2) 2555 Yes
Ni S2 2.421(10) . Yes
C S2 1.637(3) . Yes
N1 C1 1.327(3) . ?
N1 C5 1.358(4) . ?
N2 C12 1.309(3) . ?
```

بعض البنود تكون إلزامية لتطبيقات CIF معينة، على سبيل المثال، قائمة بنود

البيانات المطلوبة لإرسال النشر إلى Acat Crystallographica Section C تكون معطاة في

تلك المجلة على هيئة [3] Notes for Author.

(ج) بنود بيانات معينة قد تخصص على أنها كودات أو شفرات قياسية ولا بد لهذه أن تستخدم متى يكون ممكناً. على سبيل المثال هناك الآن ثمان شفرات قياسية لمعالجة ذرات H أثناء تنقيح متلازماً مع مسمى البيانات `_refine_ls_hydrogen_treatment` وتشمل هذه إعادة تدلي `refall` (كل بارامترات H منقحة) وبناء (مثل نموذج تراكيي). لو أن الشفرات القياسية لا تكون ملائمة أو متوافقة فرما يعطي تفسير موضح كجزء من مقطع عملي.

(د) يوجد الآن عدد كبير من برامج مساعدة متاحة لإعداد، لاختبار، المعالجة واستخلاص بيانات CIF. بعض من هذه ستذكر فيما بعد والأخرى تكون معطاة على صفحة الانترنت IUCr (www.iucr.org).

(هـ) جداول إضافية يمكن أن تُنشأ بداخل تصميم CIF. الأكثر شيوعاً لهذه تحتوي على بارامترات ترابط هيدروجيني ويوجد الآن بيانات `_geom_hbond` قياسية لتسهيل مدخلاتها. رغم ذلك فإنه يكون من الممكن أن تحضر جداول من بارامترات غير قياسية بتعريف بنود بيانات إضافية: يسجل المثال الأتي تلامسات Si...O بين-جزئية قصيرة:

```
loop_
  _publ_manuscript_incl_extra_item
  _publ_manuscript_incl_extra_defn
  'geom_extra_table_head_A'      No
  'geom_table_footnote_A'       No
  'geom_bond_atom_site_label_Si' No
  'geom_bond_atom_site_label_O' No
  'geom_contact_distance_SiO'   No
  'geom_contact_site_symmetry_O' No

  _geom_extra_table_head_A
  ;
  Intermolecular distances for contacts of the type Si...O (١%A)
  ;

loop_
  _geom_bond_atom_site_label_Si
  _geom_bond_atom_site_label_O
  _geom_contact_distance_SiO
  _geom_contact_site_symmetry_O
  'Atom Si' 'Atom O' Distance 'Symmetry operator' a''
  Si1 O6      2.363(4) 1555
  Si3 O2      2.420(6) 1545
  Si4 O7      2.227(3) 2767
```

```
_geom_table.footnote_A
```

```
^a^ Applies to oxygen atom in each case
```

(١٦,٥) بعض التدرّيات Some practicalities

(١٦,٥,١) سلاسل Strings

إن التعامل الصحيح مع السلاسل يكون أساسياً هناك ثلاث طرق لإمداد معلومات في هذه ومثال لكل واحد كالتالي:

(أ) تحديد بفرغات: يكون بند البيانات بشكل فعلي هو كلمة أو رقم بدون مسافات بداخلها: لا يمكن لبند البيانات أن يمتد خلف سطر مثل:

```
_publ_contact_author_email    J.O-Groats@north.ac.uk
_cell_length_a                10.446(3)
_diffn_standards_number       3
```

لاحظ أن J. O-Groats@north.ac.uk. and 10.446 (3) غير مسموح بها.

(ب) تحديد بعلامات استشهادية: بند البيانات قد يحتوي الآن على مسافات. إنها تكون محددة بسطر واحد، لكن قد يمكنها أن تكون على الخط التالي لمسمى البيانات لو تطلب الأمر. على سبيل المثال:

```
_expt_crystal_density_method  'not measured'
_chemical_formula_moiety       'C12 H24 S6 Cu2+, 2(P F6 -)'
_publ_section_acknowledgements
"We thank EPSRC for a postdoctoral award (to J.O'G.)."
```

(ج) تحديد بعلامات وقف مثل الحرف الأول في خط: يكون هذا ضروري

لكتل من نص التي تزيد عن سطر في الطول على سبيل المثال:

```
_publ_section_abstract
;
```

في عنوان المركب $C_{12}H_{22}O_7$ ، تقع الجزيئات بشكل حصري في متماكب هندسي مقرون *cis geometric isomer* وتكون متصلة بترايط هيدروجيني لتكوين حلزونات تجرى موازية لاتجاه C البلوري.

(٢، ٥، ١٦) نص Text

(أ) عند تجهيز ملف بيانات، فإن معظم الجهد سوف يوجه إلى المقاطع النصية، بـ صفة خاصة `_publ_section_abstract`، `_publ_section_comment` و `_publ_section_references`. كثير من هذا يظهر كنص عادي، لكن بعض شفرات حرف خاص معين تكون مطلوبة عادة. إن الرمز السفلي أو العلوي لنص يكون محددًا بزواج صفاته من (~) و (^) على التوالي: على سبيل المثال لو أنك تريد أن يظهر $[Cu(H_2O)_4]^{2+}$ في البحث الخاص بك فإنك تكون بحاجة إلى إدخاله على هيئة $[Cu(H\sim 2\sim O)\sim 4\sim]^{+2}$. لاحظ أن هذه لا بد أن تكون مستخدمة في `_chemical_formula_moiety`، إلخ. في مناقشة الهندسة الجزيئية فإنك تكون بحاجة إلى رموز Å و °، تكون الشفرات لها %A و (not ^o^o) على التوالي. قد تحتاج أحياناً شفرات أخرى، انظر الصفحة المناسبة في مرجع [3] للقائمة الكاملة.

(ب) بعض الأخطاء البسيطة تحدث بشكل تكراري وقد تحدث مقدار ضخم من الإزعاج بسبب أن برنامج CIF يفعل بالضبط ما تخبره به وليس ما تريده. إن برنامج اختبار CIF (انظر فيما يلي) سوف يكافح لإعادة تقارير مفيدة على مواقع الأخطاء في ملف بيانات، لكن في بعض الأحيان تكون نتيجة الخطأ كبيرة أو تظهر مزاحة بعيداً عن الخطأ الأصلي، بحيث يكون البحث اليدوي ضرورياً. بعض من الأخطاء الشائعة تنشأ من أبسط الأحداث مثل الفشل في الحصول على تلامس شفرات رموز سفلية وعلوية، تناسي إغلاق أو إفعال هذه السمات يعني أن المعلومات التالية في CIF تكون مفسرة

بطريقة خاطئة. خطأ آخر متكررة هي عدم تحديد سطور النص بشكل صحيح، باستخدام enCIFer، ينبغي أن تكون قادراً على تجنب مثل تلك المشاكل.

(ج) داخل CIF، يعتمد اختيار بارامترات هندسة جزيئية على وضع `_geom_type_publ_flag` لكل بارامتر حيث `type` تكون رابطة، زاوية أو التواء. وضع إشارة علم إلى `yes` (or `y`) يشير إلى أن البارامتر المقابل ينبغي أن ينشر، أي شيء آخر (على سبيل المثال `No, n or?`) يعني انه لن ينشر. تأكد من أن هذا التحرير لا يعطل عدد بنود البيانات (شاملة `placeholder` الإشارات الموضوعية) حيث أن عملها هكذا سوف يُحدث مشاكل لأي برنامج يحاول قراءة CIF.

(٣, ٥, ١٦) اختبار (CIF) Checking the CIF

قبل أن يستخدم CIF لأي غرض كان، ينصح بدرجة كبيرة بأن يرسل للمراجعة الأوتوماتيكية. قد يتم عمل هذا بواسطة إرسال CIF بالبريد الإلكتروني إلى `checkcif@iucr.org` وفحص التقرير المعاد. تختبر طريقة `checkcif` قيمة CIF من حيث مسميات بيانات، تركيب جملة صحيحة، فقد متطلبات مجالات IUCr، توافق بيانات بلورية، زمرة فراغية صحيحة، قيم بارامتر إزاحة ذرية غير عادية، واستكمال بيانات حيود... الخ. اعتماداً على الغرض المطلوب من CIF فإن الفشل في تنفيذ عدداً محدداً من هذه الاختبارات (مثل فقد اتصالات مطلوبة) قد لا تكون مهمة حيث أن هذه قد تم تنفيذها أولاً كاختبار على ملف بيانات قبل الإرسال الإلكتروني للنشر إلى `Acta Crystallographica`. لو أنك تكون قد نفذت إلى طباعة ملصقات أو وسيلة تصوير مثل `ghostview` لابد أن ميزة الإمكانية الأخرى بإرسال CIF الخاص بك بالبريد الإلكتروني إلى `printcif@iucr.org`. قبل طبع بحثك سوف يعاد للمراجعة، إن هذا مهم بسبب أن بعض الأخطاء خاصة تلك الخاصة بالتصميم قد لا تكون مكتشفة بواسطة `checkcif`،

لكنها تكون واضحة على البحث قبل الطباعة. إن تسهيلات checkcif و printcif تكون متاحة أيضاً من خلال الموقع IUCr (www.iucr.org). بهذه الطريقة توفر printcif اختيارات إضافية من إعادة بحثك قبل الطباعة على هيئة ملف PDF أو ورق مسترسل. يمكنك أيضاً أن تجرى مراجعات إضافية ببرامج مثل PLATON [4] جاري على حاسوبك الخاص.

مراجع References

- [1] S. R. Hall, F. H. Allen and I. D. Brown, *Acta Cryst.*, 1991, A47, 655. Reprints are available from the International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CHI 2HU, UK.
- [2] S. R. Hall, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 1991, **31**, 326.
- [3] *Acta Cryst.*, 2001, C57, 129-136.
- [4] PLATON, a program for the automated analysis of molecular geometry. A. L. Spek, University of Utrecht, The Netherlands.

تمارين Exercises

(١٦,١) هذه هي نسخة جزئية من CIF التي تم إرسالها للنشر. تشمل الأخطاء عديد من الأخطاء عادة ما تحصل عند تجهيز CIF للنشر. عرف العدد الأكبر منها بقدر الإمكان.

```

ü@ü@ü@ü@ü@ü@ü@ü@ü@ü@# =====
INITIAL PUBLICATION REQUEST
# =====
.publ_contact_author
'Prof. John Smith'
;
Faculty of Pharmaceutical Sciences
John Smith University
John Smithville
IN 40678
U.S.A.
;

```

```

._publ_contact_author_email      J. Smith@xray.jsu.edu
._publ_contact_author_fax        '(1) 727 564 2209'
._publ_contact_author_phone      '(1) 727 564 2925'
._publ_contact_letter
;
._publ_requested_coeditor_name    ?
._publ_requested_journal          'Acta Crystallographica, Secti

._publ_author_name
._publ_author_address
'John Smith'                      # lastname, firstname
;
Faculty of Pharmaceutical Sciences
John Smith University
John Smithsville
IN 40678
U.S.A.
;
# =====
# TEXT
# =====
  _publ_section_title
; A new copper(II) complex of acetic acid
;
  _publ_section_abstract
; In the title compound, bis(acetato)copper(II)dihydrate

there exists a three-dimensional network of N-H...O and O-H...O
intermolecular hydrogen bonds.

; _publ_section_comment
; Acetic acid, (CH3COOH), and its derivatives have been the subject of recent interest. For
example, copper (II) dihydrate, (Cu(CH3COO)2·2H2O) has been determined as a model compound for
probing the interaction ....

....
The crystal structure is stabilized by the N-H...O and O-H...O
hydrogen bonds involving the water molecules:
N(3)-H(3)···O(2) = 2.82(5); N(1)-H(1)···O(3) = 2.82(5);
O(3)-H(3)···O(4) = 2.95);
....
;

# =====
# EXPERIMENTAL
# =====
  _chemical_compound_source
; The green acicular crystal was obtained by the slow
concentration of an aqueous solution at room temperature.

```

```

._chemical_formula_sum          'C9 H6D6N6O12 Cu'
._chemical_formula_moiety      Cu(II)[(CH3N3O4)~4~(D2O)~2~]2(D2O)'
._chemical_formula_weight      '444.44'
._symmetry_cell_setting        'triclinic'
._symmetry_space_group_name_H-M 'P1^-^'
._cell_length_a                5.267(2)
._cell_length_b                7.440(13)
._cell_length_c                9.872(2)
._cell_angle_alpha             86.15(2)
._cell_angle_beta              72.33(2)
._cell_angle_gamma             86.89(2)
._cell_volume                  354.3 (4)
._cell_formula_units_z         1
._exptl_crystal_density_diffrn '2.243'
._exptl_crystal_density_meas   ?
._exptl_crystal_density_meas   'none'
....
._computing_data_reduction     'TEXSAN. TEXRAY Structure Analysis Package (Molecular Srtucture Corporation,
1985)'
._publ_section_references      ;
                               ;
                               Beurskens, P. T. (1984). Technical Report 1984, Crystallography lab. Toernooiveld,
                               6525 Ed Nijmegen, Netherlands.
                               ....
                               Sheldrick, G. M. (1986). SHELXS86. Program for the solution of crystal structures,
                               University of G\ottingen.
                               ....
._publ_section_figure_captions
'Fig. 1'
; ORTEPII(Johnson, 1976) drawing of the title compound with the atomic
numbering scheme, viewed along the a axis.
Ellipsoids for non-H atoms correspond to 50% probability.
;
'Fig. 2'
; Packing diagram of the title compound along the a axis of the unit cell;
intermolecular hydrogen bonds are represented by dashed lines.
;
....
._publ_section_table_legends
'Table I'
; Fractional atomic coordinates and equivalent isotropic thermal parameters
(\%A^2^).
;
'Table II'
; Selected bond length (\%A) and angles (^o^).
....
loop_
._geom_bond_atom_site_label_1

```

```

_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_1
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_publ_flag
Cu(1) O(1) 2.446(8) . . yes
Cu(1) O(6) 2.468(5) . . yes
Cu(1) N(5) 1.985(4) . . yes
O(1) C(2) 1.241(7) . . yes
C(1) C(2) 1.394(9) . . yes
....

; Anisotropic_displacement_parameters.
loop_
_atom_site_label
_atom_site_U~11~
_atom_site_U~22~
_atom_site_U~33~
_atom_site_U~12~
_atom_site_U~13~
_atom_site_U~23~
Cu(1) 0.023(4) 0.021(4) 0.017 (5) -0.007(3) 0.008(4) -0.016(5)
.....
.....

```