

限られた物質の解析に向け、データベース作成の勧め

MakeMyICDD, MaterialData, CreateProfile

2010年09月06日

HelperTex

## 概要

依頼分析などで色々の物質解析を行っているとき、毎回、格子定数や指数の入力が必要になる。又、L a b o T e x や T e x T o o l s を使っていると、結晶系によっては、格子定数の指定方法や指数の変換が必要になる。その違いを E x c e l に記述して置くのも方法であるが、今回特別にフォーマットに変換し表示する方法を確立した。関係するソフトウェアは、M a k e M y I C D D , M a t e r i a l D a t a , C r e a t e P r o f i l e である。

### M a k e M y I C D D ソフトウェア

他の I C D D 検索ソフトウェアが吐き出す T X T ファイルを本フォーマットに変換する。

### M a t e r i a l D a t a ソフトウェア

M y I C D D に登録されたデータの表示と各種変換  
変換には、

波長に対する  $2\theta$  角度変換

材料座標系の Z 軸と結晶 c 軸を一致させる L a b o T e x 系への変換

H e x a g o n a l 表記された格子定数、指数を T r i g o n a l 表記に変換

### C r e a t e P r o f i l e

M y I C D D に登録された複数の物質に関して、ピークの重なり具合を確認出来る多重記録  
波長変更が可能

データ作成

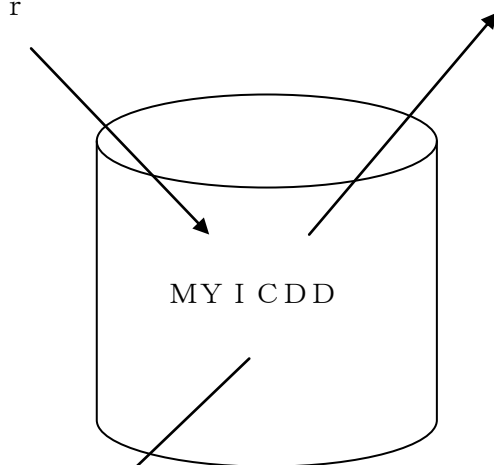
M a k e M y I C D D  
E d i t e r

データ変換表示

M a t e r i a l D a t a

重なり確認

C r e a t e P r o f i l e



## MYICDDのフォーマット

|       |                        |
|-------|------------------------|
| 1行目   | 物質名                    |
| 2行目   | 結晶系                    |
| 3行目   | 格子定数 (a)               |
| 4行目   | 格子定数 (b)               |
| 5行目   | 格子定数 (c)               |
| 6行目   | 格子定数 ( $\alpha$ )      |
| 7行目   | 格子定数 ( $\beta$ )       |
| 8行目   | 格子定数 ( $\gamma$ )      |
| 9行目   | 波長                     |
| 10行目  | 角度テーブル数                |
| 11行目  | h k l I i 2 $\theta$ i |
| n行目   | h k l I n 2 $\theta$ n |
| n+1行目 | コメント行                  |

以下にアルミニウムの例

Aluminum

0

4.0494

4.0494

4.0494

90.0

90.0

90.0

1.54056

9

|   |   |   |       |         |
|---|---|---|-------|---------|
| 1 | 1 | 1 | 100.0 | 38.472  |
| 2 | 0 | 0 | 47.0  | 44.738  |
| 2 | 2 | 0 | 22.0  | 65.133  |
| 3 | 1 | 1 | 24.0  | 78.227  |
| 2 | 2 | 2 | 7.0   | 82.435  |
| 4 | 0 | 0 | 2.0   | 99.078  |
| 3 | 3 | 1 | 8.0   | 112.041 |
| 4 | 2 | 0 | 8.0   | 116.569 |
| 4 | 2 | 2 | 8.0   | 137.455 |

コメント行は必須ではない

結晶系

0 : 立方晶 1 : 正方晶 2 : 斜方晶 3 : 菱面晶 4 : 六方晶 5 : 単斜晶 6 : 三斜晶

## データベース作成

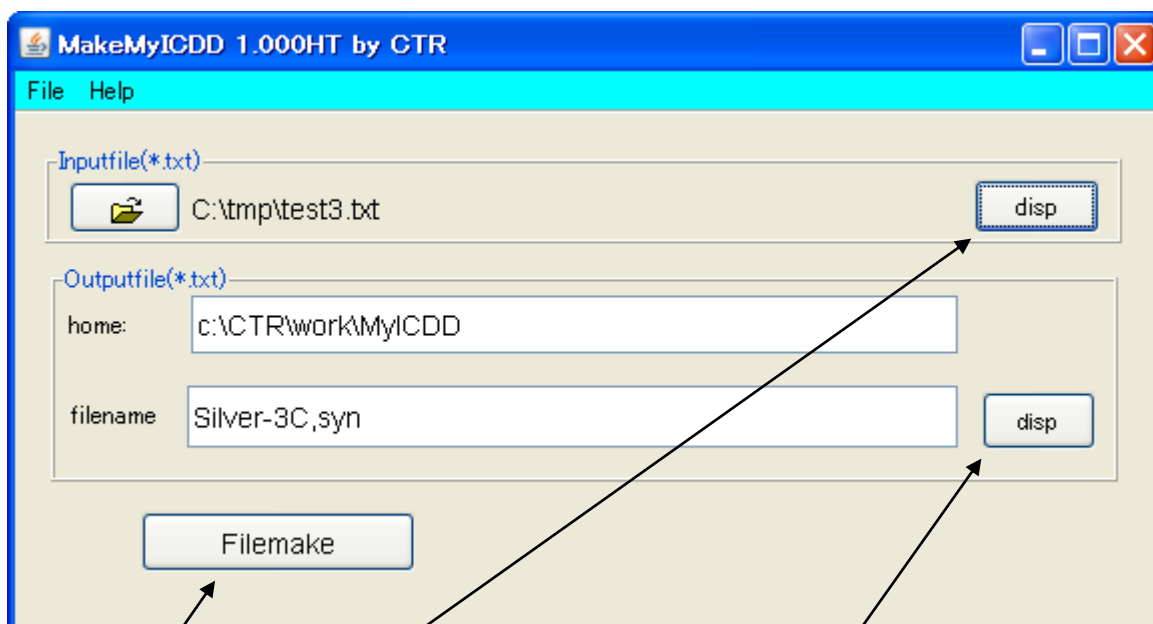
E d i t e r で作成

拡張子はT X T、ディレクトリは c:\CTR\work\MYICDD

## M a k e M y I C D D ソフトウェア

入力ファイルは以下のフォーマット

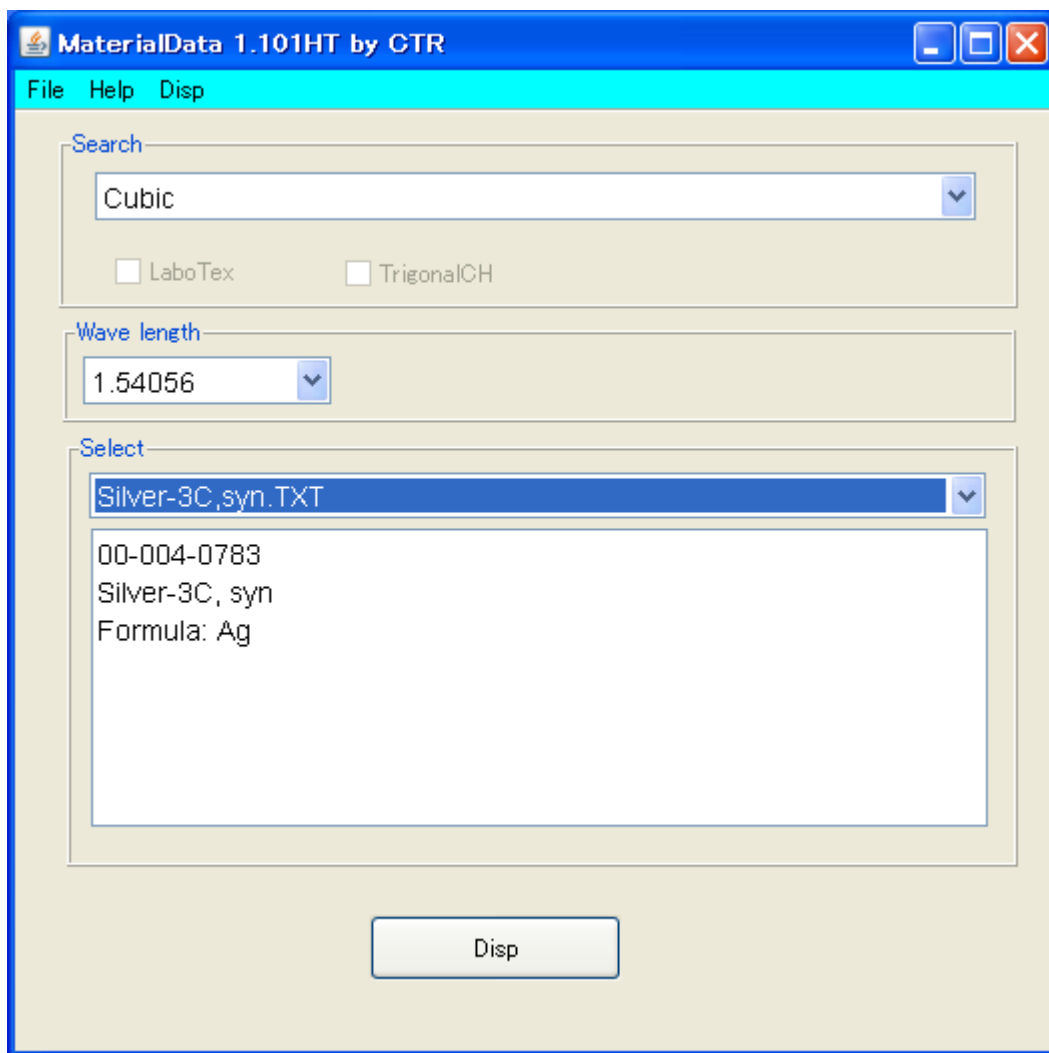
```
No: 00-004-0783 ↓
Name: Silver-3C, syn↓
Chemical Formula: Ag↓
Formula: Ag↓
Z value: 4↓
Space Group: Fm-3m(225)↓
Cell: 4.0862 4.0862 4.0862 90.000 90.000 90.000↓
Volume: 68.227↓
Crystal System: Cubic↓
Quality: I↓
RIR(I/Ic): 5.20↓
Subfile: Inorganic, Mineral, Alloy&Metal, Common Phase, Educational Pattern, For
ensic, NBS Pattern↓
----- Experiment↓
Radiation: CuKα1 lambda: 1.54056↓
Reference: Swanson, Tatge. Natl. Bur. Stand. (U.S.), Circ. 539I(1953)23.↓
CAS: 7440-22-4↓
----- Physical↓
Dmeas: 10.500↓
Dcalc: 10.501↓
Melting Point: 1233.600----- Comment↓
Additional Patterns: See PDF 01-087-0597. Analysis: Spectrographic analysis indi
cated faint traces of Ca, Fe and Cu. Color: ↓
Light gray metallic. General Comments: Purity >99.999%. Melting Point: 1233.6 K.
Opaque Optical Data: Opaque mineral optical ↓
data on specimen from Great Bear Lake, Canada: RR2Re=94.1, Disp.=16, VHN100=55-6
3, Color values .314, .321, 94.2, Ref.: IMA ↓
```



作成するデータを指定し、D i s p で内容が確認出来る。

ファイルを指定すると、物質名がファイル名として表示され、d i s p で変換後のファイル内容が確認出来る。

F i l e M a k e で所定の場所にファイルが作成出来る。



結晶系別に登録されている物質を表示し、指定された波長で角度変換を行う。

Silver-3C, synDISP

Cubic

4.0862 (1.0)

4.0862 (1.0)

4.0862 (1.0)

90.0

90.0

90.0

1.54056

9

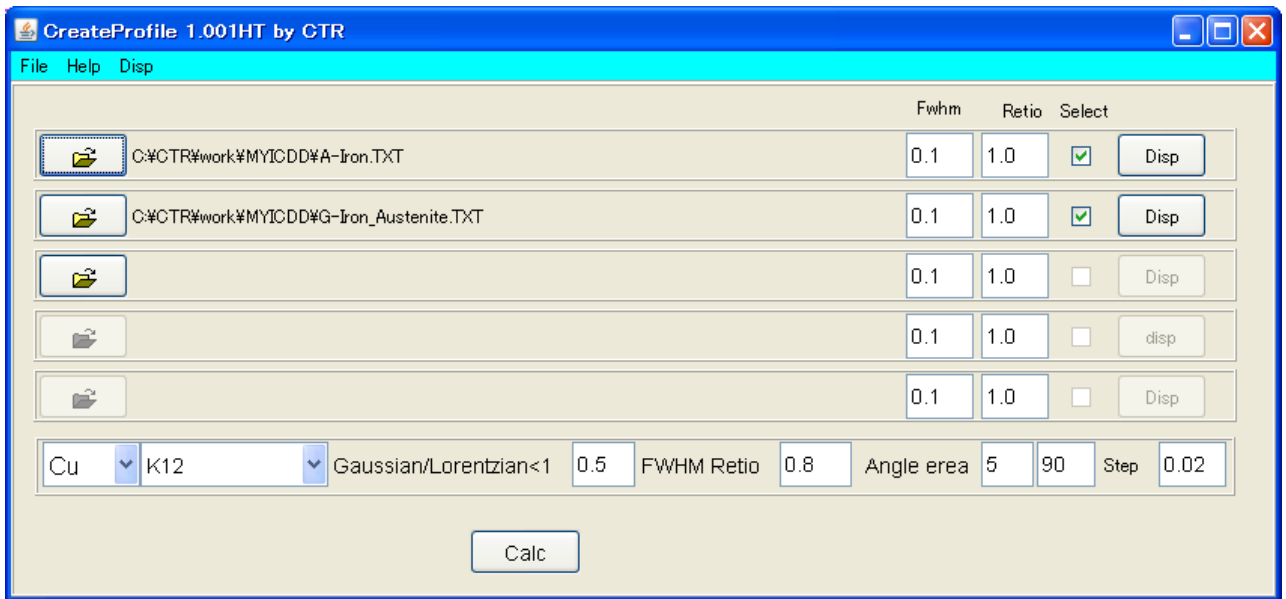
|   |   |   |       |         |
|---|---|---|-------|---------|
| 1 | 1 | 1 | 100.0 | 38.114  |
| 2 | 0 | 0 | 40.0  | 44.298  |
| 2 | 2 | 0 | 25.0  | 64.441  |
| 3 | 1 | 1 | 26.0  | 77.395  |
| 2 | 2 | 2 | 12.0  | 81.538  |
| 4 | 0 | 0 | 4.0   | 97.881  |
| 3 | 3 | 1 | 15.0  | 110.508 |
| 4 | 2 | 0 | 12.0  | 114.923 |
| 4 | 2 | 2 | 13.0  | 134.885 |

00-004-0783

Silver-3C, syn

Formula: Ag

# CreateProfileソフトウェア



複数の物質を選択しその重なり具合を表示する。

又、波長を変える事で、相互の2θ位置を変えて比較出来る。

