

# CTRソフトウェアData Base登録

2022年04月25日

*HelperTex Office*

## 概要

CTRソフトウェアではMaterial情報をMYICDDに登録する。  
登録方法は2方法あります。

- 1) PDXLから情報を取り込む
- 2) 紙ベースの情報をソフトウェアで打ち込む

### 1. PDXLから取り込む

The screenshot shows the CTR software interface with a search results window open. The window title is 'カード情報を追加'. It contains a search criteria section on the left and a search results table on the right. The search criteria include 'RigakuDemo2013' and '元素: Kapton'. The search results table lists 12 items, with item 9 selected. Item 9 is 'Corundum, syn' with chemical formula 'Al2O3'. A 'コピー' button is located at the bottom right of the search results table, and an arrow points to it from the text below.

マウスでこの部分をクリックし、コピーを表示し、メモ帳などに張り付けTXTファイルを作成  
MakeMyICDDソフトウェアに読み込み、DataBaseに登録

```
No: 9
CSD: data_Al203(Corundum.cif)
Name: Corundum, syn
Chemical Formula: Al2O3
Formula: Al2O3
Z value: 6
Space Group: R-3c:H(167)
Cell: 4.7540 4.7540 12.9820 90.000 90.000 120.000
Volume: 254.092
Quality: C
RIR(I/Ic): 1.02
Atom List: name x y z occ. Biso
Al 0.000 0.000 0.352 1.00 0.17
O 0.694 0.000 0.250 1.00 0.20
-----
d-I list (2theta are calculated with wavelength=1.54059)
2theta range: 25.60 - 98.53
2theta d I (hkl)
25.60 3.477 60.9 (0,1,2)
35.18 2.549 97.1 (1,0,4)
37.82 2.377 45.6 (1,1,0)
41.71 2.164 0.4 (0,0,6)
43.40 2.083 97.4 (1,1,3)
46.23 1.962 1.5 (2,0,2)
52.61 1.738 50.6 (0,2,4)
57.56 1.600 100.0 (1,1,6)
59.81 1.545 2.6 (2,1,1)
61.20 1.513 3.3 (1,2,2)
61.36 1.510 7.9 (0,1,8)
66.59 1.403 40.6 (2,1,4)
```

## 2. 紙ベースから作成 (MaterialDataManual)

以下のフォーマットにNewから作成する

MaterialDataManual Free 1.01 by CTR

File Help

Create Material data

Material name(File name) Fe-alpha.TXT

Crystal Cubic New

Lattice constat

a axis 2.868 b axis 2.868 c axis 2.868

$\alpha$  90.0  $\beta$  90.0  $\gamma$  90.0

Input miller index(3 Axis) & I / I<sub>0</sub>

Between the data (tab) Example

|   |   |   |       |        |
|---|---|---|-------|--------|
| 1 | 1 | 1 | 100.0 |        |
| 1 | 1 | 0 | 100.0 | 2.028  |
| 2 | 0 | 0 | 14.8  | 1.434  |
| 2 | 1 | 1 | 28.9  | 1.1709 |
| 2 | 2 | 0 | 10.1  | 1.014  |

Wave length 1.54056

LaboTex(a<=b<=c  $\alpha$ <=90  $\beta$ <90  $\gamma$ <=90)

Chemical Formula: Fe

cif

cif

\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M Im3m

\_symmetry\_Int\_Tables\_number 229

symmetry 43 Set

Disp Cancel Return structure Modification