

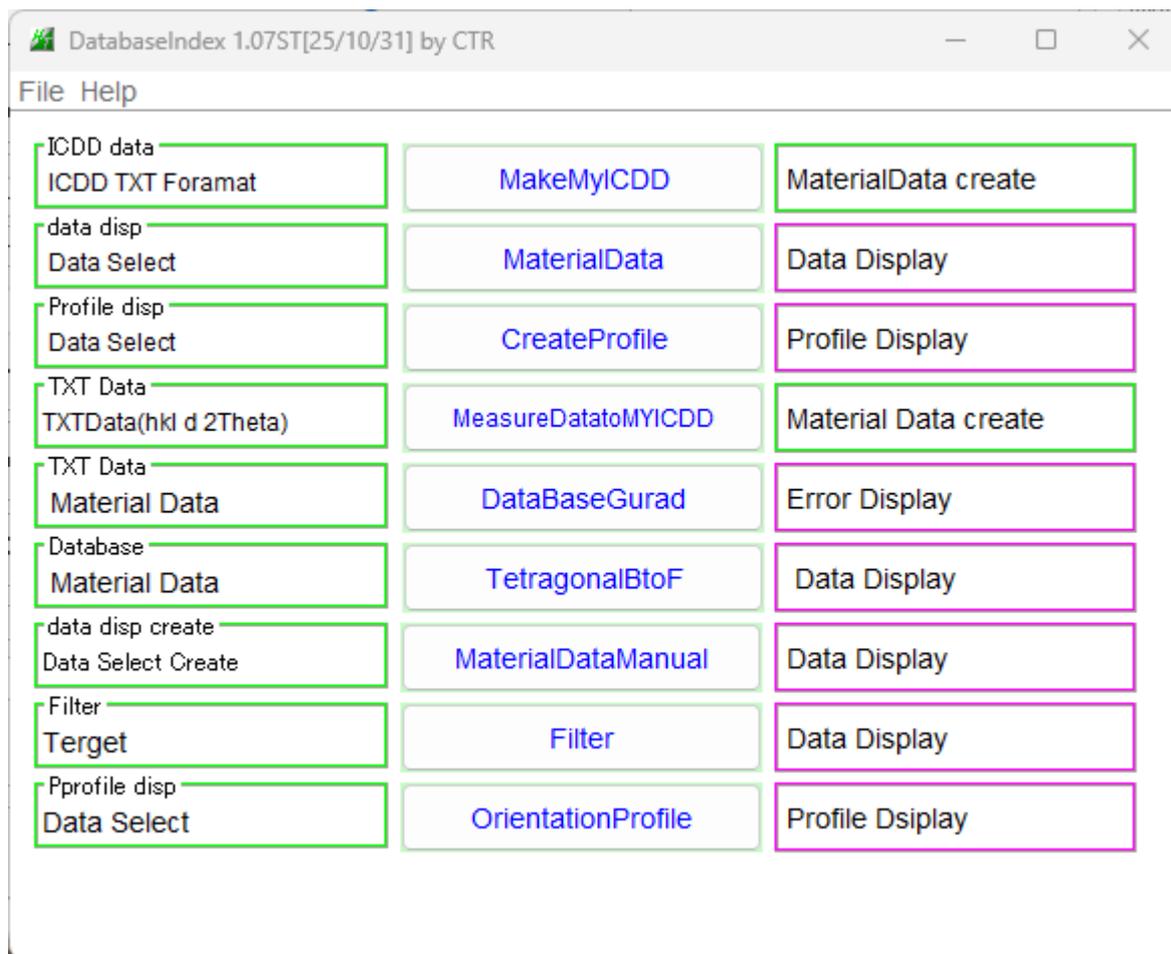
C o r u n d u m 表記

2025年09月25日

HelperTex Office

概要

CTR ソフトウェアでは、内部D a t a B a s eにより各種ソフトウェアの設定が行われている。
このD a t a B a s eの追加は、



測定データから作成 (MeasureDatatoMYICDD)

手入力による作成 (MaterialDataManual)

COD データの読み込み (MakeMYICDD)

などがあります。

本資料ではC O Dデータから登録した場合を紹介する。

CODから Corundum データの download

[Corundum](#)



Newham R E, de Haan Y M



Zeitschrift fur Kristallographie 117 (1962) 235-237

Refinement of the alpha Al2O3, Ti2O3, V2O3 and Cr2O3 structures

Locality: synthetic

database_code amcsd 0010593

4.7589 4.7589 12.991 90 90 120 R-3c

```
atom  x y  z
Al    0 0 .3520
O     .306 0 .25
```

[Download AMC data \(View Text File\)](#)

[Download CIF data \(View Text File\)](#)

[Download diffraction data \(View Text File\)](#)

[View JMOL 3-D Structure \(permalink\)](#)

重要な情報

Corundum
Newham R E, de Haan Y M
Zeitschrift fur Kristallographie 117 (1962) 235-237
Refinement of the alpha Al2O3, Ti2O3, V2O3 and Cr2O3 structures
Locality: synthetic
database_code amcsd 0010593

CELL PARAMETERS: 4.7589 4.7589 12.9910 90.000 90.000 120.000
SPACE GROUP: R-3c

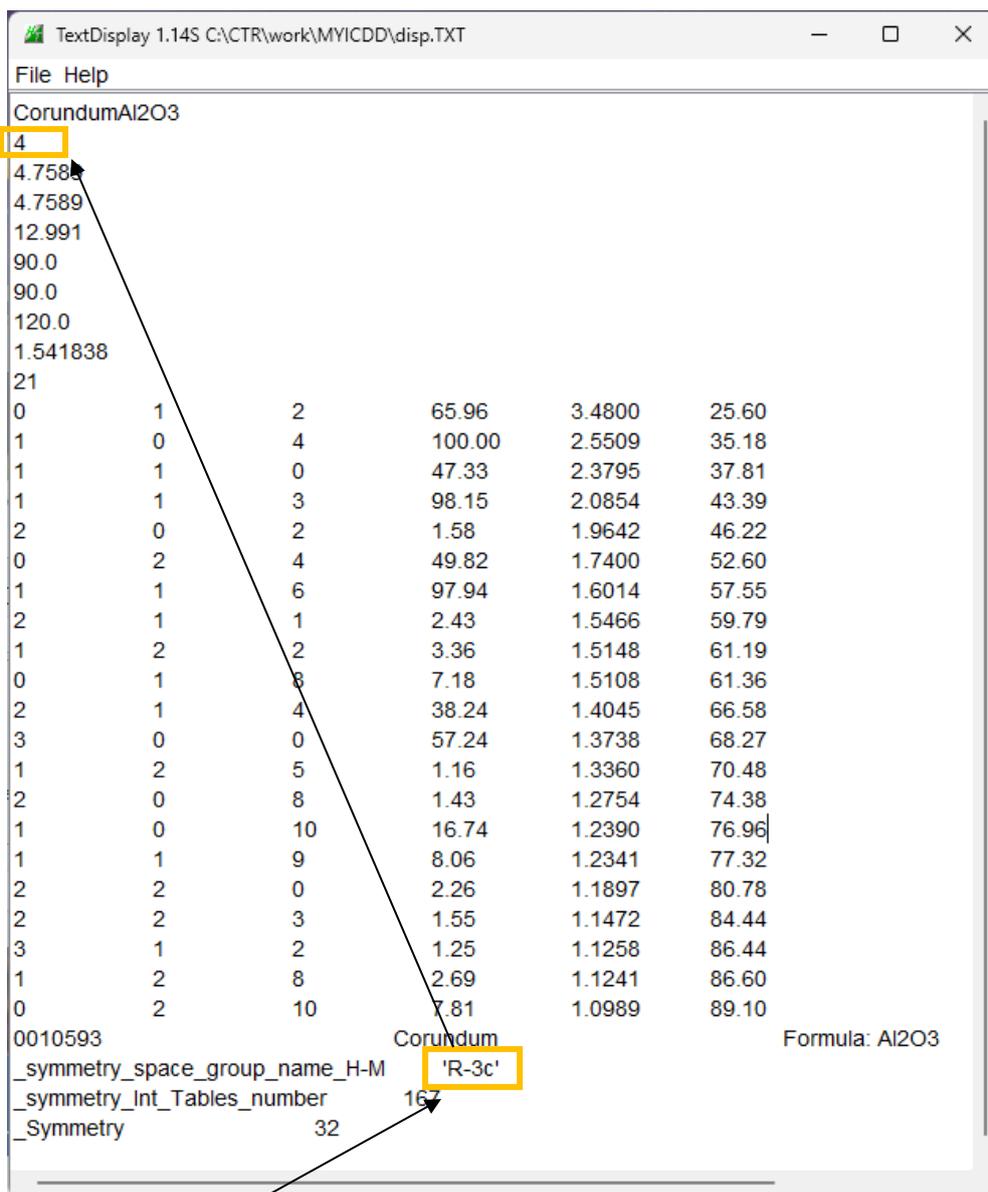
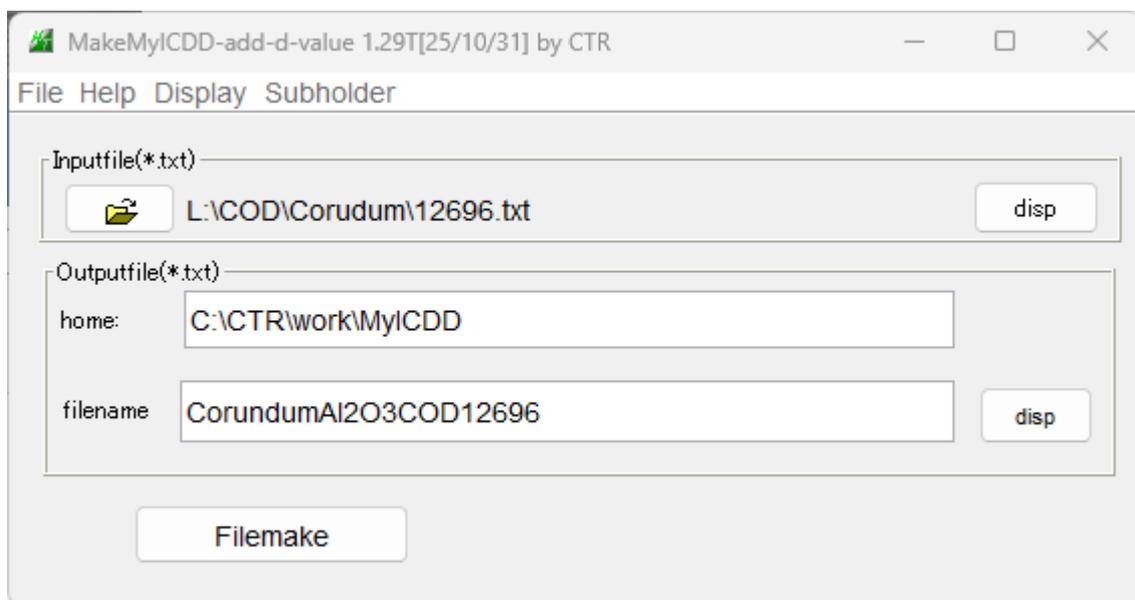
```
X-RAY WAVELENGTH: 1.541836
Cell Volume: 254.792
Density (g/cm3): 3.986
MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 11.44019512
RIR: 0.934
RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739
```

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
25.60	65.96	3.480	0	1	2	6
35.18	100.00	2.550	1	0	4	6
37.81	47.33	2.379	1	1	0	6
43.39	98.15	2.085	1	1	3	12
46.22	1.58	1.964	2	0	2	6
52.60	49.82	1.740	0	2	4	6
57.55	97.94	1.601	1	1	6	12
59.79	2.43	1.546	2	1	1	12
61.19	3.36	1.514	1	2	2	12
61.36	7.18	1.510	0	1	8	6
66.58	38.24	1.404	2	1	4	12
68.27	57.24	1.373	3	0	0	6
70.48	1.16	1.336	1	2	5	12
74.38	1.43	1.275	2	0	8	6
76.96	16.74	1.239	1	0	10	6
77.32	8.06	1.234	1	1	9	12
80.78	2.26	1.189	2	2	0	6
84.44	1.55	1.147	2	2	3	12
86.44	1.25	1.125	3	1	2	12
86.60	2.69	1.124	1	2	8	12
89.10	7.81	1.098	0	2	10	6

XPOW Copyright 1993 Bob Downs, Ranjini Swaminathan and Kurt Bartelmehs
or reference, see Downs et al. (1993) American Mineralogist 78, 1104-1107.

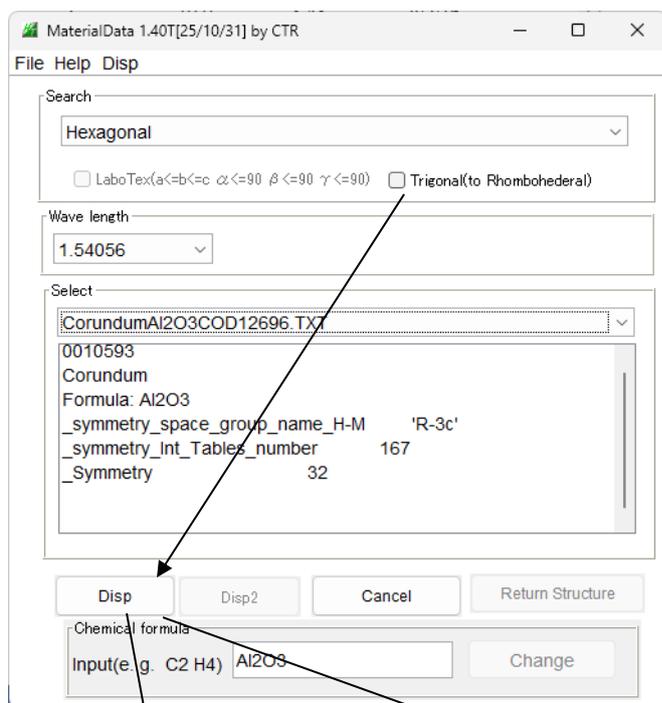
```
data_global
chemical_name_mineral 'Corundum'
loop
publ_author_name
Newham R E
de Haan Y M
journal_name_full 'Zeitschrift fur Kristallographie'
journal_volume 117
journal_year 1962
journal_page_first 235
journal_page_last 237
publ_section_title
Refinement of the alpha Al2O3, Ti2O3, V2O3 and Cr2O3 structures
database_code_amcsd 0010593
chemical_compound_source 'Synthetic'
chemical_formula_sum 'Al2 O3'
cell_length_a 4.7589
cell_length_b 4.7589
cell_length_c 12.991
cell_angle_alpha 90
cell_angle_beta 90
cell_angle_gamma 120
cell_volume 254.792
exptl_crystal_density_diffn 3.987
symmetry_space_group_name_H-M 'R -3 c'
loop
space_group_symop_operation_xyz
x, y, z
2/3+x, 1/3+y, 1/3+z
1/3+x, 2/3+y, 2/3+z
x, x-y, 1/2+z
2/3+x, 1/3+x-y, 5/6+z
1/3+x, 2/3+x-y, 1/6+z
y, x, 1/2-z
2/3+y, 1/3+x, 5/6-z
1/3+y, 2/3+x, 1/6-z
-x+y, y, 1/2+z
2/3-x+y, 1/3+y, 5/6+z
1/3-x+y, 2/3+y, 1/6+z
-x, -x+y, 1/2-z
2/3-x, 1/3-x+y, 5/6-z
1/3-x, 2/3-x+y, 1/6-z
-y, -x, 1/2+z
2/3-y, 1/3-x, 5/6+z
1/3-y, 2/3-x, 1/6+z
x-y, -y, 1/2-z
2/3+x-y, 1/3-y, 5/6-z
1/3+x-y, 2/3-y, 1/6-z
y, -x+y, -z
2/3+y, 1/3-x+y, 1/3-z
1/3+y, 2/3-x+y, 2/3-z
-x+y, -x, z
2/3-x+y, 1/3-x, 1/3+z
1/3-x+y, 2/3-x, 2/3+z
-x, -y, -z
2/3-x, 1/3-y, 1/3-z
1/3-x 2/3-y 2/3-y
```

データ (TXT,CIF) の読み込み



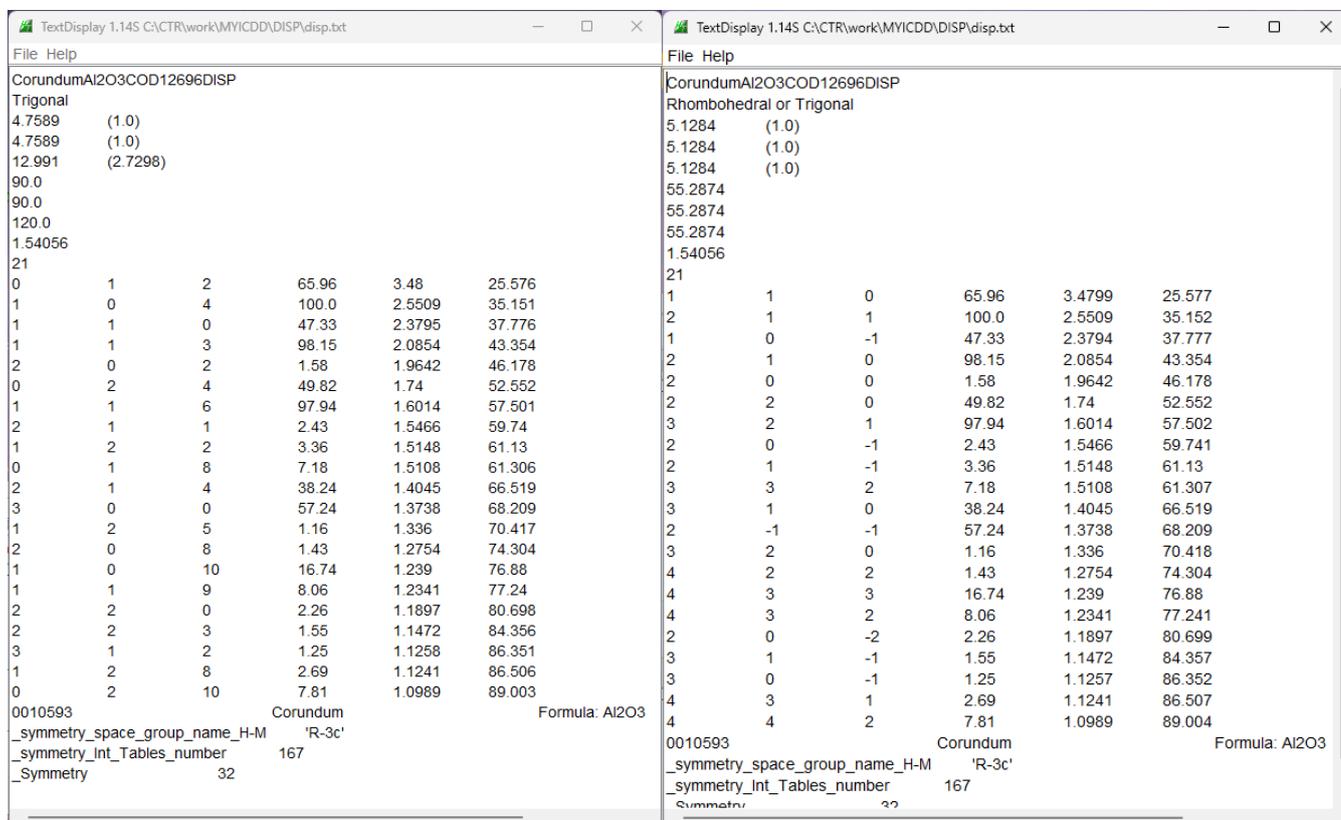
trigonalで登録されるが、格子定数と指数はHexagonalで表記
 $-H+K+L=3n$ が成立している。

登録されたファイルを表示



Trigonal

Rhombohedral or Trigonal



Hexagonal で表示

Trigonal で表示

指数は変わるが、d 値、2θ 角度は同一