

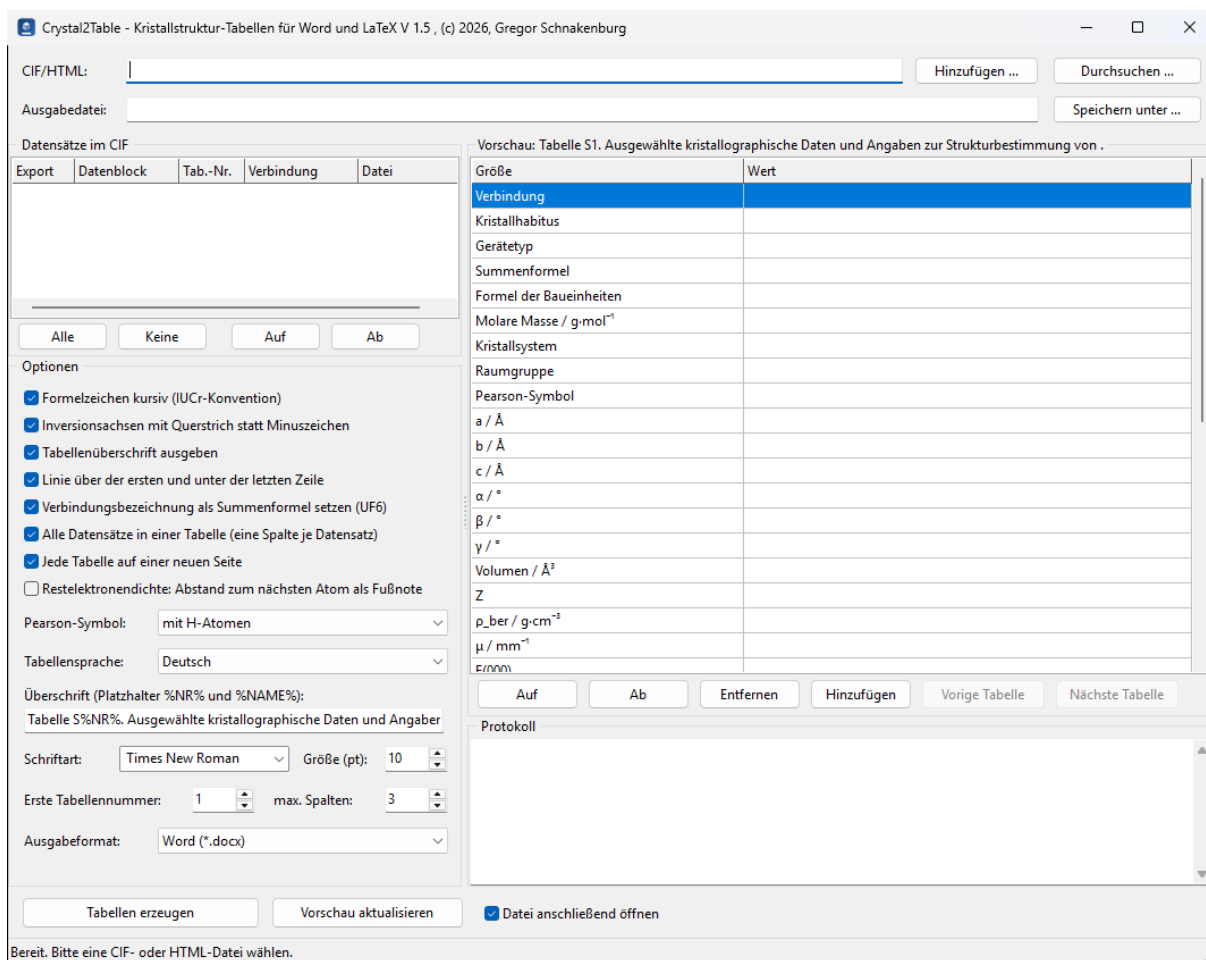
Crystal2Table – Kurzanleitung

Zu Programmfassung V 1.5

Crystal2Table erzeugt aus kristallographischen Daten die Tabelle „Selected crystallographic data and details of the structure determination“ – als Word-Datei (.docx) oder als LaTeX-Quelltext (.tex.txt). Gelesen werden CIF-Dateien und Strukturberichte im HTML-Format (siehe unten). Enthält eine Datei mehrere data_-Blöcke oder werden mehrere Dateien geladen, entsteht wahlweise eine Tabelle je Datensatz oder eine gemeinsame Tabelle mit einer Spalte je Datensatz.

Das Programm braucht kein installiertes Word: es schreibt die .docx-Datei selbst. Ohne Parameter gestartet, erscheint die Oberfläche; mit --cif=... läuft es im Stapelbetrieb (siehe letzter Abschnitt).

Das Fenster im Überblick



- **Oben:** die beiden Pfade – CIF-Datei und Word-Datei – mit den Knöpfen **Durchsuchen ...** und **Speichern unter ...**
- **Links oben:** die Liste der Datensätze im CIF
- **Links unten:** die Optionen
- **Rechts oben:** die Vorschau der Tabelle
- **Rechts unten:** das Protokoll

- **Unten: Word-Tabellen erzeugen, Vorschau aktualisieren und Datei anschließend öffnen;** ganz unten die Statuszeile

Die Trennlinie zwischen linker und rechter Hälfte lässt sich verschieben; Fenstergröße und -lage bleiben bis zum nächsten Start erhalten. Wird das Fenster zu klein für alle Optionen, bekommt der Optionenkasten eine Bildlaufleiste – erreichbar bleibt damit jede Option.

Schritt für Schritt

1. Datei wählen

Durchsuchen ... öffnet den Dateidialog; dort lassen sich mehrere Dateien auf einmal markieren – CIF-Dateien (.cif), HTML-Berichte (.html) oder beides gemischt. Ihre Datenblöcke landen gemeinsam in der Liste, die Spalte „Datei“ zeigt die Herkunft. Im Eingabefeld können mehrere Pfade auch von Hand eingetragen werden, mit Semikolon getrennt und mit der Tabulatortaste bestätigt. Dateien in Windows-1252-Kodierung (ANSI) werden beim Lesen nach UTF-8 gewandelt.

Hinzufügen ... lädt weitere Dateien **zusätzlich**: die schon eingerichteten Zeilen bleiben mit Reihenfolge, Häkchen und geänderten Bezeichnungen stehen, die neuen Datensätze kommen ans Ende der Liste. **Durchsuchen ...** beginnt dagegen von vorn.

Dateien lassen sich auch mit der Maus ins Fenster ziehen – einzeln oder mehrere auf einmal, an jede Stelle des Fensters. Ist noch nichts geladen, werden sie sofort geöffnet; sonst fragt das Programm, ob sie **hinzugefügt** werden oder die geladenen **ersetzen** sollen. Ordner werden übergangen und im Protokoll vermerkt; die Dateien kommen in der Reihenfolge ihrer Namen in die Liste.

Blöcke ohne Strukturdaten (z. B. data_global) werden erkannt und nicht vorausgewählt; das Protokoll vermerkt sie.

2. Datensätze einstellen

Die Liste hat fünf Spalten:

- **Export** – Häkchen: dieser Datensatz kommt in die Word-Datei
- **Datenblock** – Name im CIF (nicht änderbar)
- **Tab.-Nr.** – Tabellennummer, wird automatisch durchnummeriert
- **Verbindung** – Bezeichnung für die Überschrift; Vorgabe ist der Name des Datenblocks. Zum Ändern die Zelle anklicken und tippen
- **Datei** – aus welcher CIF-Datei der Block stammt

Unter der Liste wählen **Alle** und **Keine** sämtliche bzw. keine Datensätze aus. **Auf** und **Ab** verschieben den angewählten Datensatz und legen damit die Reihenfolge der Tabellen fest – bei der gemeinsamen Tabelle die Reihenfolge der Wertespalten. Die Tabellennummern werden dabei neu vergeben.

Gleiche Zellparameter

Alle sechs Zellparameter stehen in der Tabelle. Was die Symmetrie gleichsetzt, wird aber nicht zweimal beziffert, sondern verweist auf den ersten Parameter seiner Gruppe. Im Monoklinen steht also $\alpha = 90^\circ$ und $\gamma = \alpha$; im Orthorhombischen $\beta = \alpha$ und $\gamma = \alpha$; im Tetragonalen zusätzlich $b = a$; im Kubischen ausserdem $c = a$. Im Trigonalen und Hexagonalen gilt $b = a$ und $\beta = \alpha$, während $\gamma = 120^\circ$ ausgeschrieben dasteht; in rhomboedrischer Aufstellung sind alle drei Kanten und alle drei Winkel gleich.

Verwiesen wird nur, wenn im CIF wirklich derselbe Wert steht. Weicht ein Wert trotz des angegebenen Kristallsystems ab, steht er ausgeschrieben da – eher ist dann die Angabe zum Kristallsystem falsch als der gemessene Wert.

3. Vorschau lesen

Rechts steht die Tabelle so, wie sie geschrieben wird. Hoch- und Tiefstellungen sind dort durch Unicode-Zeichen angedeutet ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$, p_{ber}). Die Vorschau zeigt **alle** eingestellten Zeilen – auch solche, für die dieser Datensatz keinen Wert hat. In der Word-Datei entfallen leere Zeilen.

Ausnahme: der Flack-Parameter bleibt bei nicht zentrosymmetrischen Raumgruppen als leere Zelle stehen, damit ein fehlender Wert beim Korrekturlesen auffällt.

Ist „Alle Datensätze in einer Tabelle“ eingeschaltet, zeigt die Vorschau die gemeinsame Tabelle mit einer Spalte je Datensatz; sonst den in der Liste angewählten Datensatz.

4. Zeilen der Tabelle einrichten

- **Auf / Ab** verschieben die angewählte Zeile
- **Entfernen** nimmt alle angewählten Zeilen heraus – mehrere wählt man mit gedrückter Umschalttaste oder gezogener Maus
- **Hinzufügen** öffnet eine Liste aller weiteren Größen, die das Programm aus dem CIF ziehen kann: Farbe, Kristallform, $R_{\text{int}}/R_{\sigma}$, Anzahl Parameter/Restrictions/Constraints, einzelne Miller-Bereiche, Wellenlänge, verwendete Programme, CCDC-Nummer und weitere. Die angekreuzten Zeilen werden hinter der gerade angewählten Zeile eingefügt. **Alle auswählen** und **Alle abwählen** kreuzen die ganze Liste an oder nehmen alle Kreuze weg
- **Vorige Tabelle / Nächste Tabelle** blättern durch die Tabellen, wenn aus den Daten mehr als eine entsteht: bei zusammengefassten Datensätzen durch die Blöcke zu je „max. Spalten“ Datensätzen, sonst durch die Datensätze selbst

5. Beschriftungen ändern

Die Beschriftung einer Zeile lässt sich in der Spalte „Größe“ direkt überschreiben: Zelle anklicken und tippen. Dabei gilt die CIF-Schreibweise:

- $\wedge 3^{\wedge}$ hochgestellt, z. B. $\text{\AA}^3$
- $\sim \text{calc} \sim$ tiefgestellt, z. B. $p_{\sim \text{calc} \sim}$
- $\backslash a \backslash b \backslash g \dots$ für griechische Buchstaben (α , β , γ)
- $\$V\$$ kursiv – zwischen zwei Paragraphenzeichen
- $\$Z\$$ fett – zwischen zwei Dollarzeichen

Die Auszeichnungen lassen sich mischen und mit Hoch- und Tiefstellung verbinden: aus $\$p\$_{\sim \text{calc} \sim}$ wird p kursiv mit tiefgestelltem calc . In Werten aus dem CIF bleiben $\$$ und $\$$ gewöhnlicher Text – nur selbst eingetippte Beschriftungen kennen die Auszeichnung. Ist die Option „Formelzeichen kursiv“ abgeschaltet, entfällt mit allen anderen auch die eigene Kursivsetzung.

In der Vorschau steht die Beschriftung gesetzt da ($V / \text{\AA}^3$). Sobald die Zelle zum Bearbeiten aufgeht – Doppelklick oder F2 –, erscheint wieder die Schreibweise mit den Steuerzeichen ($\$V\$ / \text{\AA}^3$), auch bei Zeilen, die noch nie von Hand benannt wurden. Wird das Bearbeiten abgebrochen oder nichts geändert, bleibt die Beschriftung, wie sie war.

Eine leere Eingabe stellt die ursprüngliche Beschriftung wieder her.

6. Datei schreiben

Tabellen erzeugen schreibt die Datei unter dem Pfad im Feld „Ausgabedatei“. Ist das Feld leer, wird der Name der ersten Eingabedatei mit der passenden Endung benutzt. Existiert die Datei bereits, wird nachgefragt. Mit **Datei anschließend öffnen** startet Word gleich nach dem Schreiben – bei LaTeX der Texteditor.

Das **Ausgabeformat** entscheidet, was geschrieben wird: eine Word-Datei (.docx) oder LaTeX-Quelltext (.tex.txt). Bei LaTeX bestimmt das Zieldokument die Schrift, deshalb sind Schriftart und -größe abgeschaltet. Ausgegeben wird nur die Tabelle – `table` mit `tabular`, die Überschrift in `\caption`. LaTeX numeriert dabei selbst, deshalb entfällt die eigene Nummer aus der Vorlage; für die Zählung „S1“ gehört `\renewcommand{\thetable}{S\arabic{table}}` in den Vorspann (steht als Kommentar in der Datei). Ohne „Tabellenüberschrift ausgeben“ bleibt nur das nackte `tabular`. Sonderzeichen werden in LaTeX-Befehle umgesetzt; ein Zusatzpaket braucht die Datei nicht.

Wird eine Option umgestellt, die das Vorschaubild verändert – Querstrich, Überschrift und ihre Vorlage, Verbindungsname als Summenformel, Fußnote zur Restelektronendichte, Pearson-Symbol, Sprache, gemeinsame Tabelle, Spaltenzahl, erste Tabellenummer –, baut sich die Vorschau sofort neu auf. Linien, Seitenumbruch, Schriftart und Schriftgröße wirken erst in der geschriebenen Datei und lassen die Vorschau unberührt.

Vorschau aktualisieren baut die Vorschau neu auf, ohne etwas zu schreiben – nötig nur noch, wenn sich die Eingabedatei auf der Festplatte geändert hat.

HTML-Berichte statt CIF

Aus einem Strukturbericht im HTML-Format wird die erste Tabelle gelesen – die mit den kristallographischen Daten. Danach läuft alles wie bei einem CIF: dieselben Zeilen, dieselben Sprachen, dieselbe Formatierung.

Der **Verbindungsname** steht im Bericht unter „Identification code“ vor dem //. Stehen dort zwei durch Komma getrennte Namen, gilt der, der **nicht** mit den ersten vier Zeichen des Dateinamens beginnt: in GCLU677.html wird aus „GCLU677, APA-030 // GXraymo_9769f“ der Name APA-030. In der Liste lässt er sich wie immer überschreiben.

Liegt neben GCLU677.html die Datei GCLU677.res, werden daraus die Werte ergänzt, die der Bericht nicht führt: Restelektronendichte, Zahl der beobachteten Reflexe, Wichtungsschema, Extinktion und Zwillingsanteil. Was im Bericht steht, bleibt unangetastet – die .res-Datei füllt nur Lücken.

Optionen

Option	Wirkung
Formelzeichen kursiv	$\alpha, b, c, \alpha, \beta, \gamma, Z, \rho, \mu, F, T, \Theta, \lambda, h, k, l, R_1, wR_2, I, \sigma$, der Serienbuchstabe der Strahlung (Mo-K α) sowie die Buchstaben von Raumgruppen- und Pearson-Symbol werden kursiv gesetzt, Ziffern bleiben aufrecht (IUCr-Konvention).
Inversionsachsen mit Querstrich	P -1 wird als $P\bar{1}$ gesetzt – der Querstrich entsteht als Word-Formelobjekt wie beim Setzen von Hand. Ausgeschaltet erscheint stattdessen $P-1$.
Tabellenüberschrift ausgeben	Zeile über der Tabelle nach der Vorlage im Feld „Überschrift“.
Linie oben/unten	Waagerechte Linie über der ersten und unter der letzten Tabellenzeile.

Option	Wirkung
Ausrichtung	Die Beschriftungen stehen linksbündig, die Werte ab der zweiten Spalte zentriert – in Word wie in LaTeX.
Verbindungsbezeichnung als Summenformel	Setzt die Bezeichnung in der Überschrift als Formel: aus UF6 wird UF ₆ . Zahlen, die nicht auf ein Elementsymbol folgen, bleiben unverändert – Bezeichnungen wie 10 oder 1a also auch.
Alle Datensätze in einer Tabelle	Statt einer Tabelle je Datensatz eine gemeinsame Tabelle: Spalte 1 die Größen, danach eine Spalte je Datensatz mit der Verbindungsbezeichnung als Kopfzeile. Größen, die nur ein Teil der Datensätze hat (Flack-Parameter), bleiben in den übrigen Spalten leer.
Jede Tabelle auf einer neuen Seite	Seitenumbruch vor jeder weiteren Tabelle.
Restelektronendichte: Abstand zum nächsten Atom als Fußnote	Hängt an die Werte der Zeile „Größte Restelektronendichte“ hochgestellte Buchstaben und schreibt die Abstände zum nächsten Atom unter die Tabelle (siehe unten).
Pearson-Symbol	Nicht ausgeben, mit H-Atomen, ohne H-Atome oder beide Varianten. Bei „beide“ stehen sie in einer Zeile, durch „ „ getrennt (<i>mP222</i> , <i>mP82</i>). Die Zeile entfällt, wenn Summenformel, Z oder Kristallsystem fehlen.
Tabellensprache	Deutsch, amerikanisches oder britisches Englisch. Umgestellt werden die Beschriftungen der ersten Spalte, die Vorlage der Überschrift, das Kristallsystem (monoklin/monoclinic), die Art der Absorptionskorrektur (numerisch/numerical), die Kristallform und die Farbe (schwarzer Block/black block), „Nr.“/„No.“, <i>R</i> indices/indexes, colour/color, das Sprachkennzeichen der Word-Datei (Rechtschreibprüfung) – und die Oberfläche selbst. Zahlenwerte bleiben unverändert.
Überschrift	Vorlage mit den Platzhaltern %NR% (Tabellennummer) und %NAME% (Verbindung). Bei der gemeinsamen Tabelle werden die Bezeichnungen nach den Regeln der Tabellensprache verbunden: „1, 2 und 3“ auf Deutsch, „1, 2, and 3“ auf Englisch. Alles bis zum ersten Punkt oder Doppelpunkt sowie %NAME% werden fett gesetzt – bei mehreren Datensätzen nur die Bezeichnungen, nicht die Trennzeichen dazwischen.
Ausgabeformat	Word (.docx) oder LaTeX (.tex.txt). Beim Umschalten wird die Endung der Ausgabedatei mitgeführt.
Schriftart / Größe	Vorgabe Times New Roman, 10 pt. Die Größe wird in ganzen Punkt angegeben. Die Breite der ersten Spalte richtet sich nach der längsten Beschriftung und der Schriftgröße; bei kleiner Schrift wird sie schmaler, der frei werdende Platz geht an die Wertespalten.
Erste Tabellennummer	Nummer der ersten Tabelle; die weiteren werden fortlaufend vergeben.
max. Spalten	Höchstzahl der Wertespalten je Tabelle (Vorgabe 3). Sind mehr Datensätze ausgewählt, folgt eine weitere Tabelle mit eigener Nummer und eigener Überschrift. Alle Teiltabellen bekommen dieselben Spaltenbreiten, damit sie untereinander bündig stehen.

Minuszeichen vor Zahlen werden immer als echtes Minuszeichen (U+2212) gesetzt – in Exponenten ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$, mm^{-1} , $\text{e}\cdot\text{\AA}^{-3}$), in Indexbereichen, in Restelektronendichten und im Flack-Parameter. Bindestriche in Wörtern (multi-scan, goodness-of-fit) bleiben unangetastet.

Sprache der Oberfläche

Die Auswahl „Tabellensprache“ stellt auch die Programmführung um: Fenstertitel, Beschriftungen, Knopftexte, Auswahllisten, Spaltenüberschriften, Dateidialoge, das Fenster „Hinzufügen“, die Statuszeile und die Meldungen im Protokoll. „Deutsch“ führt zurück ins Deutsche. Amerikanisches und britisches Englisch unterscheiden sich nur in der Tabelle, nicht in der Oberfläche. Bereits geschriebene Protokollzeilen bleiben in ihrer Sprache stehen.

Einstellungen

Alle Optionen, die Zeilenreihenfolge, geänderte Beschriftungen sowie Größe und Lage des Fensters werden beim Beenden gespeichert und beim nächsten Start wieder geladen. Sie stehen in der Datei `crystal2table.ini` neben dem Programm; ist dieser Ordner schreibgeschützt, im Benutzerprofil unter `AppData\Local\crystal2table`.

Nicht gespeichert wird die Reihenfolge der Datensätze – sie gehört zur gerade geladenen Datei.

Absorptionskorrektur

In einer deutschen Tabelle werden die Angaben aus `_expt1_absorpt_correction_type` übersetzt, soweit sie im Deutschen anders heißen: `numerical` wird zu numerisch, `integration` zu Integration, `analytical` zu analytisch, `empirical` zu empirisch, `semi-empirical` zu semi-empirisch, `none` zu keine, `sphere` zu Kugel und `cylinder` zu Zylinder. Groß- und Kleinschreibung spielt dabei keine Rolle.

`multi-scan`, `psi-scan` und `gaussian` bleiben stehen, ebenso jede Angabe, die nicht genau einem der übersetzten Begriffe entspricht – etwa der ganze Satz `Semi-empirical from equivalents`. In der englischen Tabelle bleibt der Wert immer, wie er im CIF steht.

Kristallhabitus: Form und Farbe

In einer deutschen Tabelle werden Form und Farbe des Kristalls übersetzt – in den Zeilen „Kristallform“ und „Farbe“ und zusammen in der Zeile „Kristallhabitus“. Die Formen: `block` wird zu Block, `plate` zu Platte, `needle` zu Nadel, `plank` zu Planke, `prism` zu Prisma und `rod` zu Stäbchen.

Die Farbe steht davor und wird nach der Form gebeugt: aus `black block` wird „schwarzer Block“, aus `black plate` „schwarze Platte“, aus `black prism` „schwarzes Prisma“. Steht keine Form dahinter – in der Zeile „Farbe“ oder wenn das CIF nur eine Farbe nennt –, bleibt sie ungebeugt.

Übersetzt werden `colourless` farblos, `white` weiß, `black` schwarz, `grey` grau, `brown` braun, `red` rot, `pink` rosa, `orange` orange, `yellow` gelb, `green` grün, `blue` blau, `violet` violett, `metallic` metallisch, `lustrous` glänzend und `clear` klar. Die Bestimmungswörter `light`, `dark`, `pale`, `deep`, `dull` und die Formen auf `-ish` wachsen mit der Farbe zu einem Wort zusammen: aus `dark red block` wird „dunkelroter Block“, aus `pale yellow needle` „blassgelbe Nadel“.

`clear` beschreibt den Kristall selbst und wird deshalb ebenfalls gebeugt: aus `clear yellow block` wird „klarer gelber Block“, aus `clear yellow needle` „klare gelbe Nadel“. `metallic` und `lustrous` bestimmen dagegen die Farbe näher und bleiben ungebeugt: „metallisch schwarzer Block“.

Übersetzt wird nur, wenn alle Teile bekannt sind. Steht in der Farbe ein Wort, das nicht in der Liste vorkommt (`mauve`), oder ist die Form keine der sechs (`shard`, die Mehrzahl `blocks`, `thin needle`), bleibt die ganze Angabe so stehen, wie sie im CIF steht – lieber englisch als halb übersetzt.

Fußnote zur Restelektronendichte

Die Option **Restelektronendichte: Abstand zum nächsten Atom als Fußnote** hängt an die Werte der Zeile „Größte Restelektronendichte“ hochgestellte Buchstaben und schreibt unter die Tabelle, wie weit der Peak vom nächsten Atom entfernt liegt, zum Beispiel „a) 0.64 Å von N3; b) 0.88 Å von Ga“. Die Buchstaben laufen über die ganze Tabelle durch – in einer gemeinsamen Tabelle also Spalte für Spalte.

Liegt neben der Eingabedatei eine **Listing-Datei von SHELXL (.lst)**, werden Peak und Loch von dort genommen; SHELXL hat den Abstand dann schon gerechnet. Sonst wird der höchste Q-Peak der res-Datei genommen und sein Abstand zum nächsten Atom hier gerechnet – mit allen Symmetrieoperationen, der Zentrierung und den Gittertranslationen. Das tiefste Loch steht nicht in der res-Datei; es bekommt dann keine Fußnote.

Nächstes Atom heißt: das nächste überhaupt, auch ein Wasserstoff – genau wie in der Listing-Datei von SHELXL. Gibt es weder Listing- noch res-Datei, bleibt die Zeile, wie sie ohne die Option wäre.

Extinktion und Zwillingsanteil aus der Listing-Datei

Wird eine Struktur über einen HTML-Bericht und die res-Datei geladen, stehen Extinktionskoeffizient (EXTI) und Zwillingsanteil (BASF) dort als nackte Zahl ohne Standardabweichung. Liegt daneben die **Listing-Datei von SHELXL (.lst)**, wird die Klammer von dort geholt: SHELXL führt nach jedem Verfeinerungszyklus die Parameter auf, die zu keinem Atom gehören, und nennt zu jedem die Unsicherheit. Aus 0.06678 und 0.00127 wird so 0.0668(13) – dieselbe Schreibweise, die SHELXL auch in sein eigenes CIF schreibt.

Aus dem Listing kommt dabei nur die Klammer: der Wert selbst bleibt der aus Bericht oder res-Datei, und eine Zeile, die es ohne das Listing nicht gäbe, entsteht nie. Steht die Klammer schon in der Tabellendatei oder im CIF, bleibt sie unangetastet. Alles beim Alten bleibt es auch, wenn die Eingabedatei mehrere Datenblöcke enthält, wenn das Listing nicht zum Stand der res-Datei passt, oder wenn SHELXL eine der Unsicherheiten nicht bestimmen konnte – nach einer Verfeinerung mit CGLS etwa steht im Listing gar keine solche Tabelle.

Stapelbetrieb (Kommandozeile)

Wird `--cif=` angegeben, startet keine Oberfläche; das Programm schreibt die Tabellendatei – je nach Einstellung `.docx` oder `.tex.txt` – und beendet sich. Alle Datenblöcke mit Strukturdaten werden ausgegeben.

```
crystal2table.exe "--cif=Eins.cif;Zwei.cif" --out=Tabellen.docx --start=2 --onetable
```

Das Semikolon trennt in PowerShell und Bash Befehle; das Argument mit mehreren Dateien gehört deshalb in Anführungszeichen (in `cmd.exe` nicht nötig).

Grundlage sind die in der Oberfläche gespeicherten Einstellungen einschließlich Zeilenreihenfolge und eigener Beschriftungen; die Schalter der Befehlszeile gehen vor. `--lang=us` ändert also nur die Sprache, alles andere bleibt wie eingestellt.

Schalter	Bedeutung
<code>--cif=Datei.cif</code>	Eingabedatei (<code>.cif</code> oder <code>.html</code>); mehrere mit Semikolon getrennt (erforderlich, löst den Stapelbetrieb aus)

Schalter	Bedeutung
--out=Datei.docx	Ausgabedatei; ohne Angabe der Name der ersten Eingabedatei mit der Endung .docx bzw. .tex.txt
--onetable	alle Datensätze in eine gemeinsame Tabelle
--maxcols=3	Höchstzahl der Wertespalten je Tabelle (1 bis 99)
--start=1	Nummer der ersten Tabelle (1 bis 9999)
--pearson=withh withouth both none	Pearson-Symbol; --no-pearson entspricht none
--lang=de us gb	Tabellensprache
--latex, --word	Ausgabeformat; ohne Angabe gilt die Einstellung der Oberfläche
--font=Arial	Schriftart
--size=10	Schriftgröße in ganzen Punkt (4 bis 72)
--pagebreak	Seitenumbruch vor jeder weiteren Tabelle
--peaknotes	Fußnote mit dem Abstand der größten Restelektronendichte zum nächsten Atom; --no-peaknotes lässt sie weg
--no-italic	Formelzeichen nicht kursiv
--no-overbar	Minuszeichen statt Querstrich
--no-caption	keine Tabellenüberschrift
--no-nameformula	Bezeichnung nicht als Summenformel setzen
--no-ini	gespeicherte Einstellungen übergehen, nur die eingebauten Vorgaben benutzen
--help	schreibt eine Übersicht über alle Schalter und beendet das Programm; auch --?, -h und /?

Ein bei --out genanntes Verzeichnis wird angelegt, falls es fehlt; endet --out mit einem Trennzeichen, gilt es als Verzeichnis und der Dateiname kommt aus der Eingabe. Das Protokoll bekommt den Namen der Ausgabedatei mit der Endung .log (Tabellen.docx wird zu Tabellen.log). In der ersten Zeile steht, welche Einstellungsdatei benutzt wurde. Rückgabewerte: 0 in Ordnung, 1 kein --cif, 2 Eingabedatei nicht lesbar, 3 kein verwertbarer Datenblock, 4 Ausgabedatei nicht schreibbar, 5 unerwarteter Fehler. Lässt sich auch das Protokoll nicht schreiben, geht die Meldung auf den Fehlerkanal (2> fehler.txt). Ein Wert außerhalb des zulässigen Bereichs, ein unbekannter Schalter und ein Tippfehler stehen als Hinweis im Protokoll; gerechnet wird dann mit der Vorgabe.

Lizenz

Crystal2Table steht unter der BSD-3-Clause-Lizenz. Copyright (c) 2026, Gregor Schnakenburg. Der vollständige Lizenztext liegt dem Programm als Datei LICENSE bei; er erlaubt Weitergabe und Änderung, verlangt aber, dass Urhebervermerk, Lizenztext und Haftungsausschluss erhalten bleiben.

Das Programm enthält fest eingebundene Teile der Lazarus-LCL und der Free-Pascal-Laufzeitbibliothek. Beide stehen unter der LGPL mit einer Verlinkungsausnahme, die die Weitergabe des fertigen Programms unter selbst gewählten Bedingungen erlaubt. Einzelheiten nennt die beiliegende Datei THIRD-PARTY-NOTICES.md.

Das Programm wird ohne jede Gewähr geliefert. Die erzeugten Tabellen sind vor der Veröffentlichung gegen die Originaldaten zu prüfen.