

斜方晶に関して

I C D D と C O D では格子定数の取り方が異なる。たとえば、Ba₂Cu₃Y O₇ では

I C D D (P D F 3 8 - 1 4 3 3) では、3.8856 x 11.6804 x 3.8185

C O D (C R 9 2 1 0 0 4) では、3.8230 x 3.8850 x 11.673 (LaboTex でそのまま扱える)

C T R パッケージは、

C D D , C O D データを手入力、あるいは P D X L を経由して M Y I C D D データに変換している。

変換は、元の格子定数による指数で作成される。

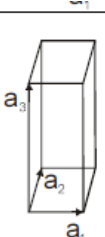
たとえば、

```
No: 00-053-1859 ↓
Name: Polyethylene↓
Chemical Formula: ( C2 H4 )n↓
Formula: C2 H4↓
Z value: --↓
Space Group: (0)↓
Cell: 7.4000 4.9300 2.5400 90.000 90.000 90.000.
      2theta    d      I      (hkl)↓
      21.66    4.100   100.0   (1,1,0)↓
      24.03    3.700    35.0   (2,0,0)↓
      30.17    2.960     5.0   (2,1,0)↓
      36.34    2.470    20.0   (0,2,0)↓
      39.86    2.260    25.0   (0,1,1)↓
      40.87    2.206    20.0   (3,1,0)↓
```

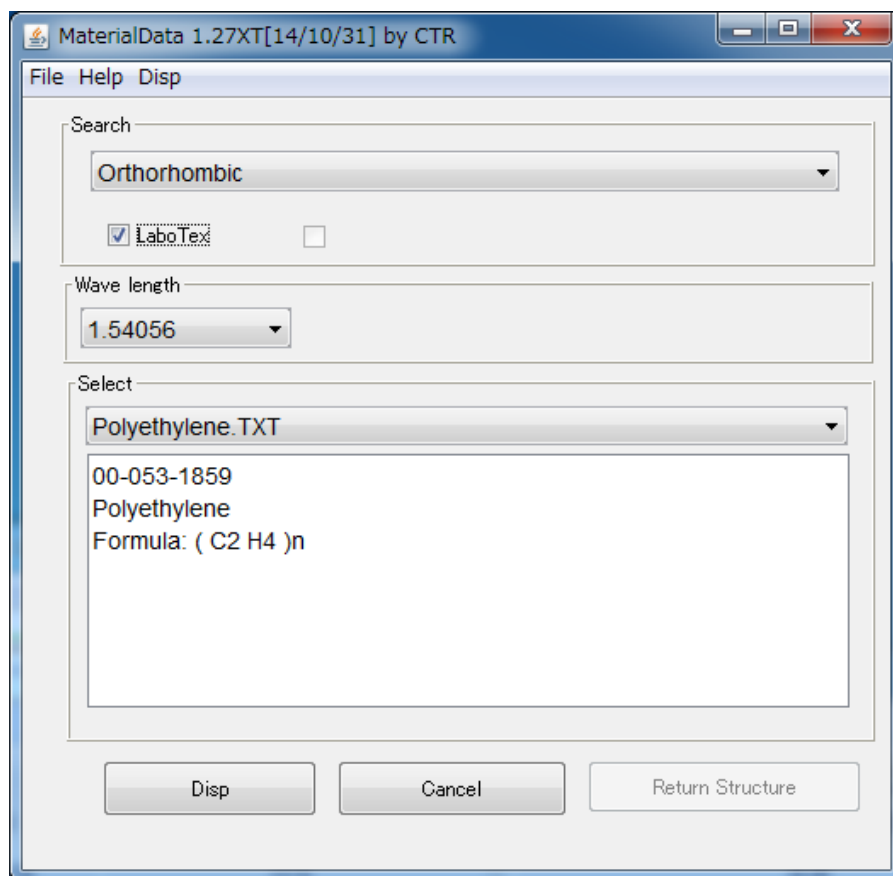
M Y I C D D の登録は

```
PolyethyleneDISP
Orthorhombic
7.4      (1.0)
4.93     (0.6662)
2.54     (0.3432)
90.0
90.0
90.0
1.54056
9
1         1         0         100.0      21.642
2         0         0         35.0       24.032
2         1         0         5.0        30.175
0         2         0         20.0       36.418
0         1         1         25.0       39.893
3         1         0         20.0       40.875
```

このような場合、LaboTex では、

Orthorhombic	D_2	D_{2h}, D_2	$a < b < c$	$90^\circ \ 90^\circ \ 90^\circ$	
	C_2	C_{2v}			

$a < b < c$ の実現のために M a t e r i a l データプログラムで軸変換を行っている。



PolyethyleneDISP

Orthorhombic

2.54 (1.0)

4.93 (1.9409)

7.4 (2.9134)

90.0

90.0

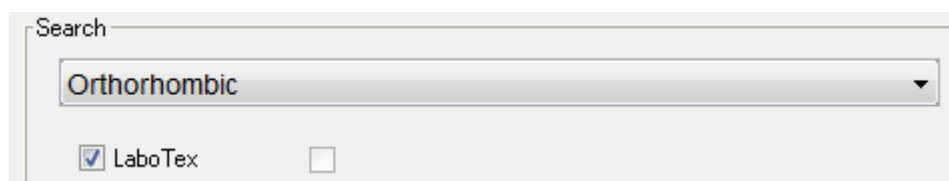
90.0

1.54056

9

0	1	1	100.0	21.642
0	0	2	35.0	24.032
0	1	2	5.0	30.175
0	2	0	20.0	36.418
1	1	0	25.0	39.893
0	1	3	20.0	40.875
1	1	1	20.0	41.792
0	2	2	15.0	44.109
1	1	3	25.0	55.095

しかし、CODのデータはL a b o T e x で扱う格子定数と同じ



L a b o T e x で表示しても変わらない