

MonoclinicをLaTeXで解析

2016年04月08日

HelperTex Office

概要

LaboTexではICDDと異なった格子定数の方式が採用されています。

LaboTexにおける方位

1.4. Crystal and sample coordinate systems. LaboTex Axis and Angles Convention.

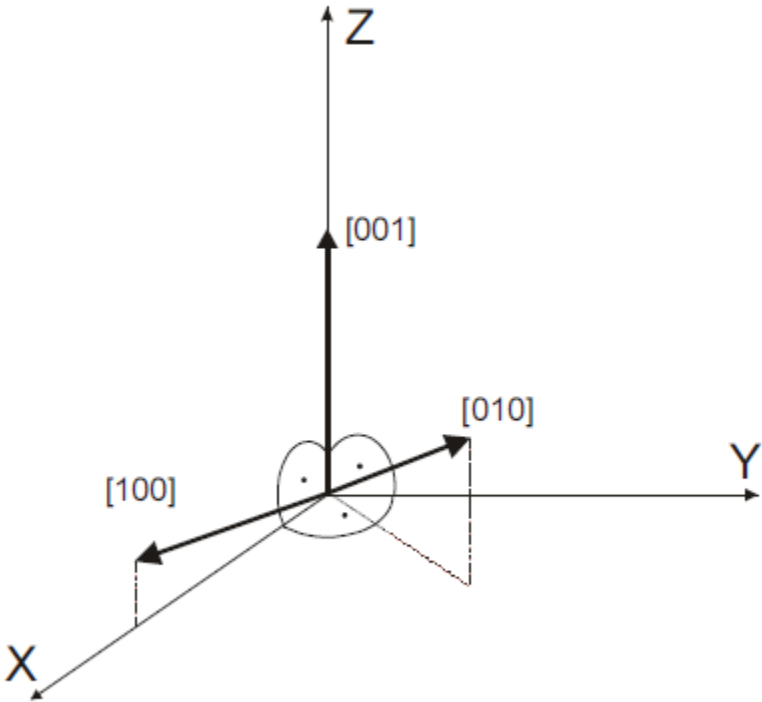
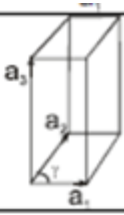


Figure 1

Monoclinic の場合

Monoclinic	C_2	C_{2h}, C_2	$a < b \neq c$	$90^\circ \ 90^\circ \ \gamma < 90^\circ$	
	C_1	C_1			

この結果、格子定数とミラー指数が変わります。

I C D Dの場合

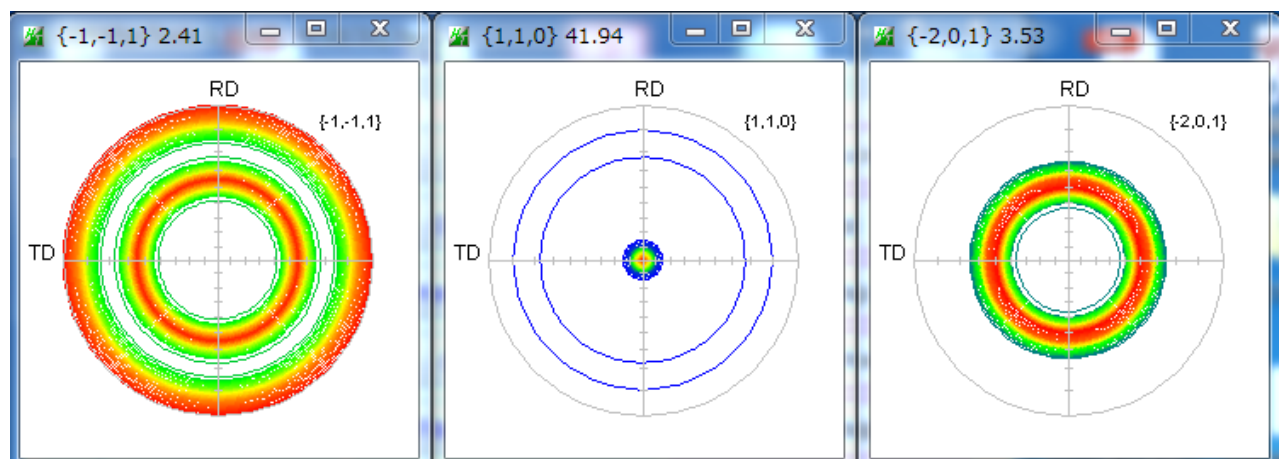
YB2Si2O7DISP					
Monoclinic					
6.7988	(1.0)				
8.8759	(1.3055)				
4.7101	(0.6928)				
90.0					
101.982					
90.0					
1.54056					
157					
1	1	0	34.9	5.3223	16.643
0	0	1	72.6	4.6075	19.248
0	2	0	20.6	4.438	19.991
1	1	-1	10.4	3.8109	23.323
2	0	0	23.5	3.3253	26.787
1	1	1	34.9	3.2282	27.609
0	2	1	100.0	3.1964	27.89
2	0	-1	64.7	3.0091	29.664
1	3	0	47.9	2.7032	33.112
2	2	0	37.3	2.6612	33.65
2	2	-1	13.0	2.4906	36.031
2	0	1	17.9	2.4645	36.426
1	3	-1	18.4	2.4225	37.081
0	0	2	13.8	2.3037	39.067
1	1	-2	3.7	2.2552	39.944

L a b o T e xの場合

YB2Si2O7DISP					
Monoclinic					
4.7101	(1.0)				
6.7988	(1.4435)				
8.8759	(1.8844)				
90.0					
90.0					
78.018					
1.54056					
157					
0	-1	1	34.9	5.3223	16.643
1	0	0	72.6	4.6075	19.248
0	0	2	20.6	4.438	19.991
-1	-1	1	10.4	3.8109	23.323
0	-2	0	23.5	3.3253	26.787
1	-1	1	34.9	3.2282	27.609
1	0	2	100.0	3.1964	27.89
-1	-2	0	64.7	3.0091	29.664
0	-1	3	47.9	2.7032	33.112
0	-2	2	37.3	2.6612	33.65
-1	-2	2	13.0	2.4906	36.031
1	-2	0	17.9	2.4645	36.426
-1	-1	3	18.4	2.4225	37.081
2	0	0	13.8	2.3037	39.067
-2	-1	1	3.7	2.2552	39.944

I C D Dから上記変換はM a t e r i a l D a t aとP F t o O D F 3が行っています。
極点図測定はI C D Dのミラー指数で行います。

測定時のミラー指数

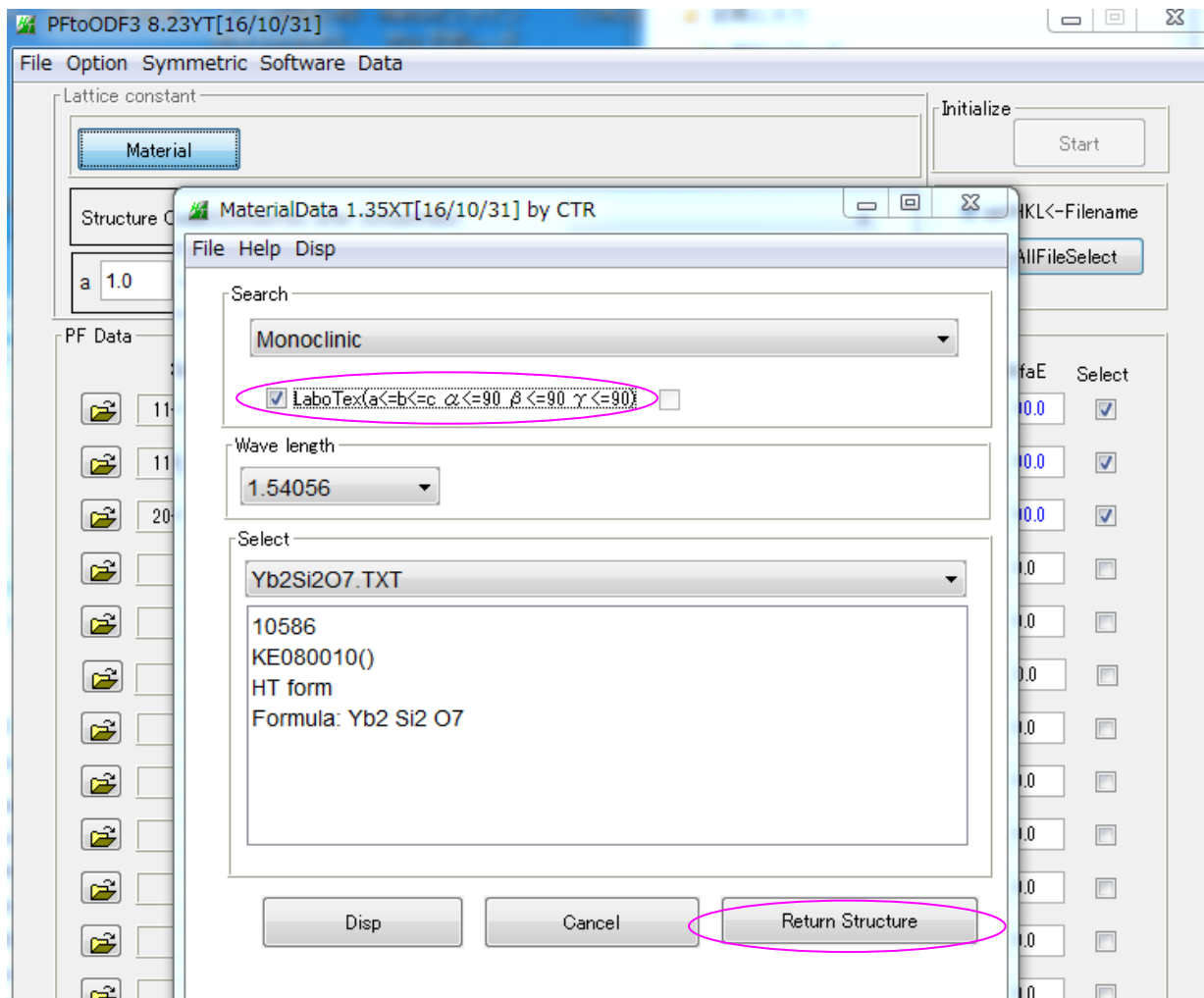


P F t o O D F 3 で読み込み

The screenshot shows the PFTtoODF3 software interface. The 'File' menu is open, and the 'PF Data' table is visible. The table lists the loaded data files and their corresponding Miller indices, 2Theta values, and other parameters.

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
11-1_2.TXT	1,1,-1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	☒
110_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	☒
20-1_2.TXT	2,0,-1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	☒
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	☐

M a t e r i a l で材料を選択



ミラー指数変換が行われます。

