

CODからcifデータdiffractionデータをdownload

CTRソフトウェアとMTEX極点図比較

2024年12月29日


HelperTex Office

1. 概要
2. CODデータのdownload
3. CODデータに登録
 3. 1 SiO₂登録の確認
 3. 2 回折プロファイルの確認
4. CTRにて方位に対する極点図の確認
5. MTEXによるシュミレーションと比較
6. 手入力によるData Base作成

1. 概要

CTRソフトウェアでは、内部データベースから各種サービスが行われている。
データベースは、`rigakuPDXL`から取り込んでいたが、一般化させるため、
CODからも取り込み可能とした。
今回、CODの`cif`と`diffraction`データからCTR内部データベースを作成し、
`CrystalOrientationDisp`ソフトウェアに簡易的な極点図作成を追加し
MTEXのシュミレーションン機能を使って、極点図の比較を行った。

2. CODデータのdownload

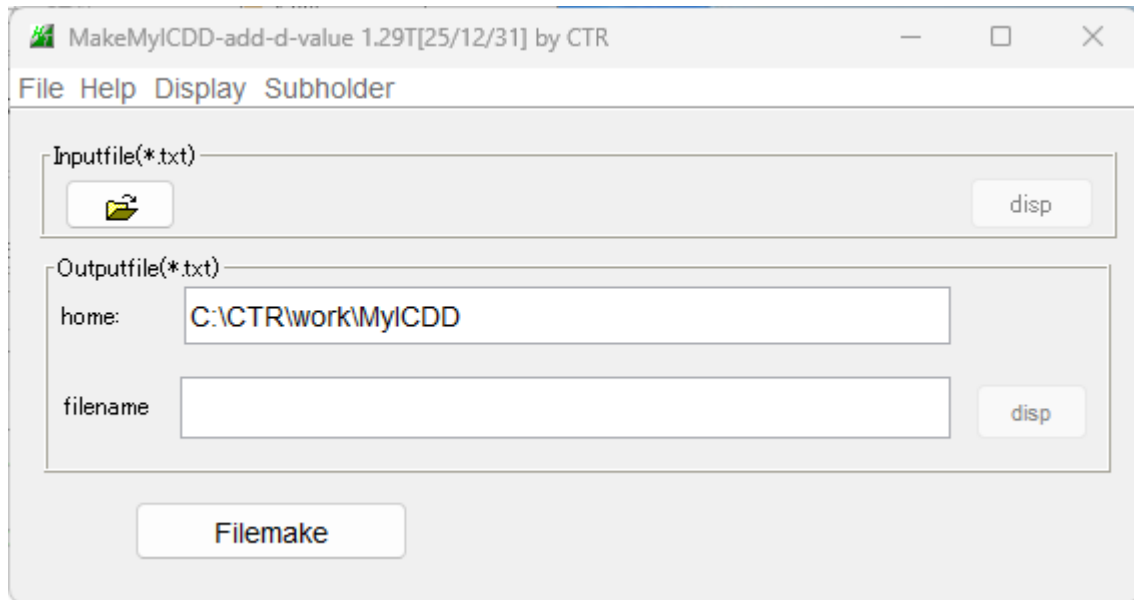
```
Dera P, Prewitt C T, Boctor N Z, Hemley R J  
 American Mineralogist 87 (2002) 1018-1023  
Characterization of a high-pressure phase of silica from the  
Martian meteorite Shergotty  
alpha-PbO2-like  
_database_code_amcsd 0002871  
4.097 5.0462 4.4946 90 90 90 Pbcn  
atom x y z Basis  
Si 0 .1522 .25 .8  
O .7336 .6245 .9186 .1  
Download AMC data \(View Text File\)  
Download CIF data \(View Text File\)  
Download diffraction data \(View Text File\)  
View JMOl 3-D Structure \(permalink\)
```

(C:) > tmp > SiO2

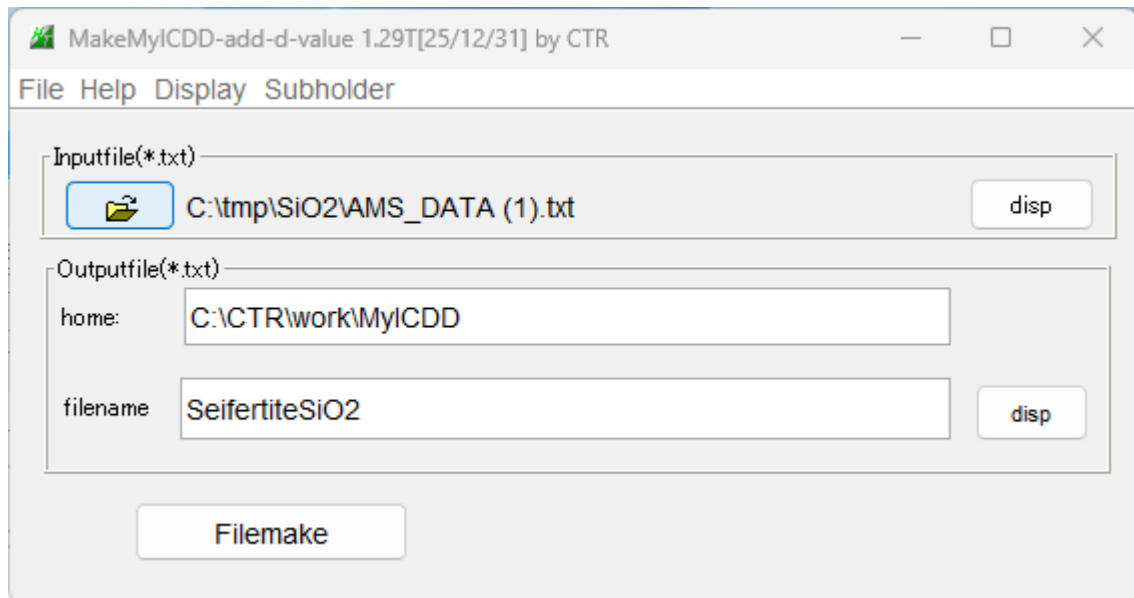
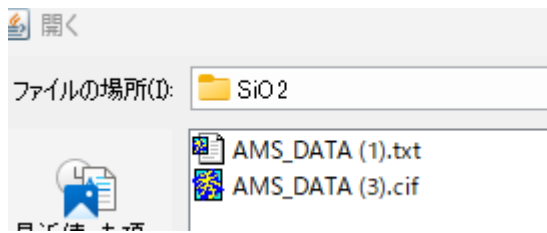
並べ替え ▾ 表示 ▾ ...

名前	更新日時	種類	サイズ
 AMS_DATA (1).txt	2024/12/28 12:47	テキスト文書	3 KB
 AMS_DATA (3).cif	2024/12/28 12:48	CIF ファイル	2 KB

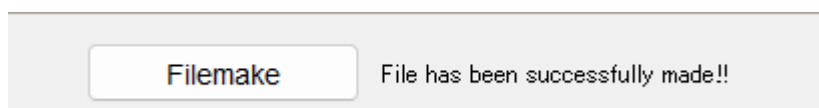
3. CODデータに登録



c i fデータとd i f r a c t i o nデータを選択



F i l e M a k e で登録する。



3. 1 SiO₂登録の確認

MaterialData 1.38T[25/12/31] by CTR

File Help Disp

Search

Orthorhombic

LaboTex(a<=b<=c α<=90 β<=90 γ<=90)

Wave length

1.54056

Select

SeifertiteSiO2.TXT

0002871
Seifertite
Formula: SiO2
_symmetry_space_group_name_H-M 'Pbcn'
_symmetry_Int_Tables_number 60
_Symmetry 22

Disp Cancel Return Structure

Chemical formula

Input(e. g. C2 H4) SiO2 Change

TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\MYICDD\DISP\disp.txt

File Help

SeifertiteSiO2DISP
Orthorhombic
4.097 (1.0)
5.0462 (1.2317)
4.4946 (1.097)
90.0
90.0
90.0
1.54056
25






1	1	0	68.63	3.1807	28.03
1	1	1	100.0	2.5963	34.517
0	2	0	4.09	2.5231	35.551
0	0	2	4.0	2.2473	40.09
0	2	1	6.78	2.2001	40.987
1	0	2	31.1	1.9703	46.026
1	2	1	60.72	1.9383	46.831
1	1	2	15.19	1.8354	49.629
0	2	2	2.22	1.6782	54.646
2	2	0	1.86	1.5903	57.94
1	3	0	15.84	1.556	59.343
2	0	2	30.66	1.5139	61.168
2	2	1	52.25	1.4993	61.831
1	3	1	1.3	1.4704	63.182
1	1	3	13.88	1.3554	69.266
3	1	0	1.09	1.3182	71.51
2	2	2	1.66	1.2982	72.792
0	2	3	25.96	1.2882	73.446

登録されています。

3. 2 回折プロファイルの確認

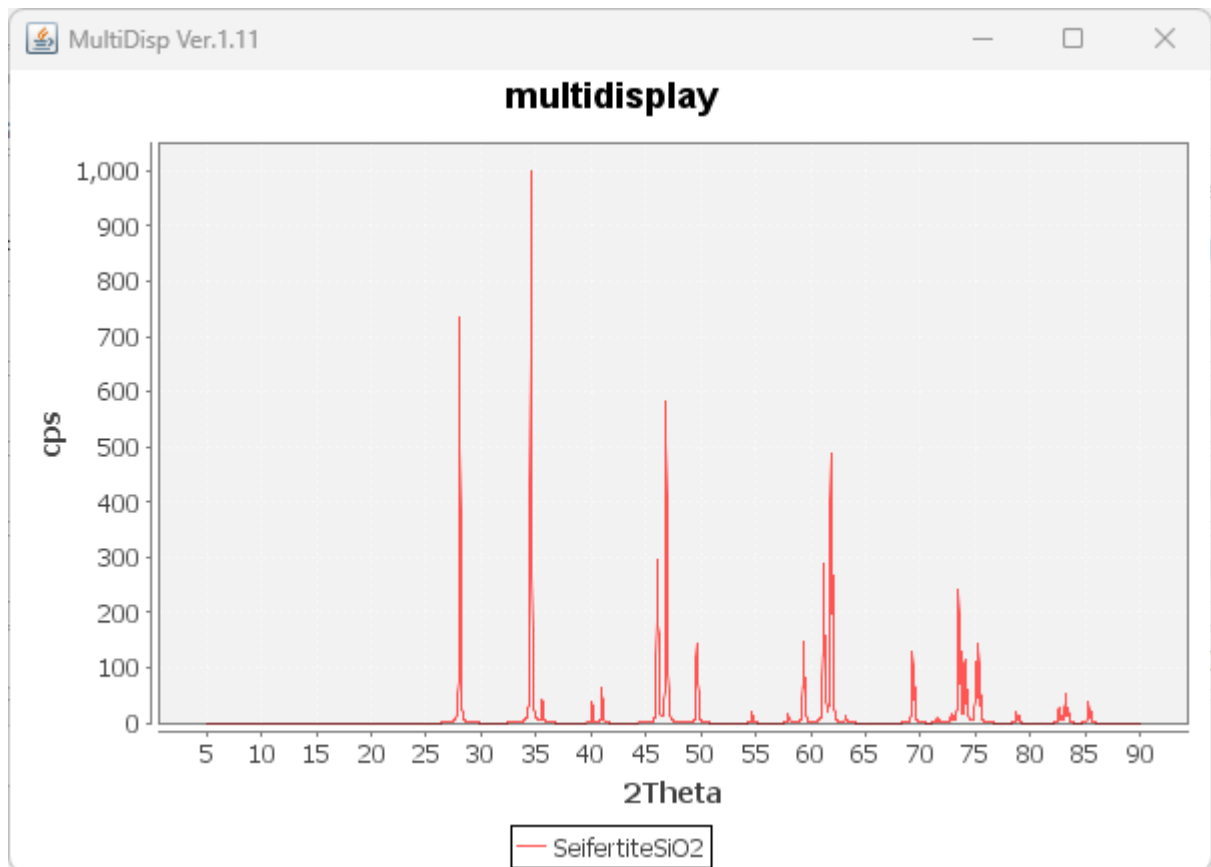
CreateProfile 1.06T[25/12/31] by CTR

File Help Disp Standardization(1000)

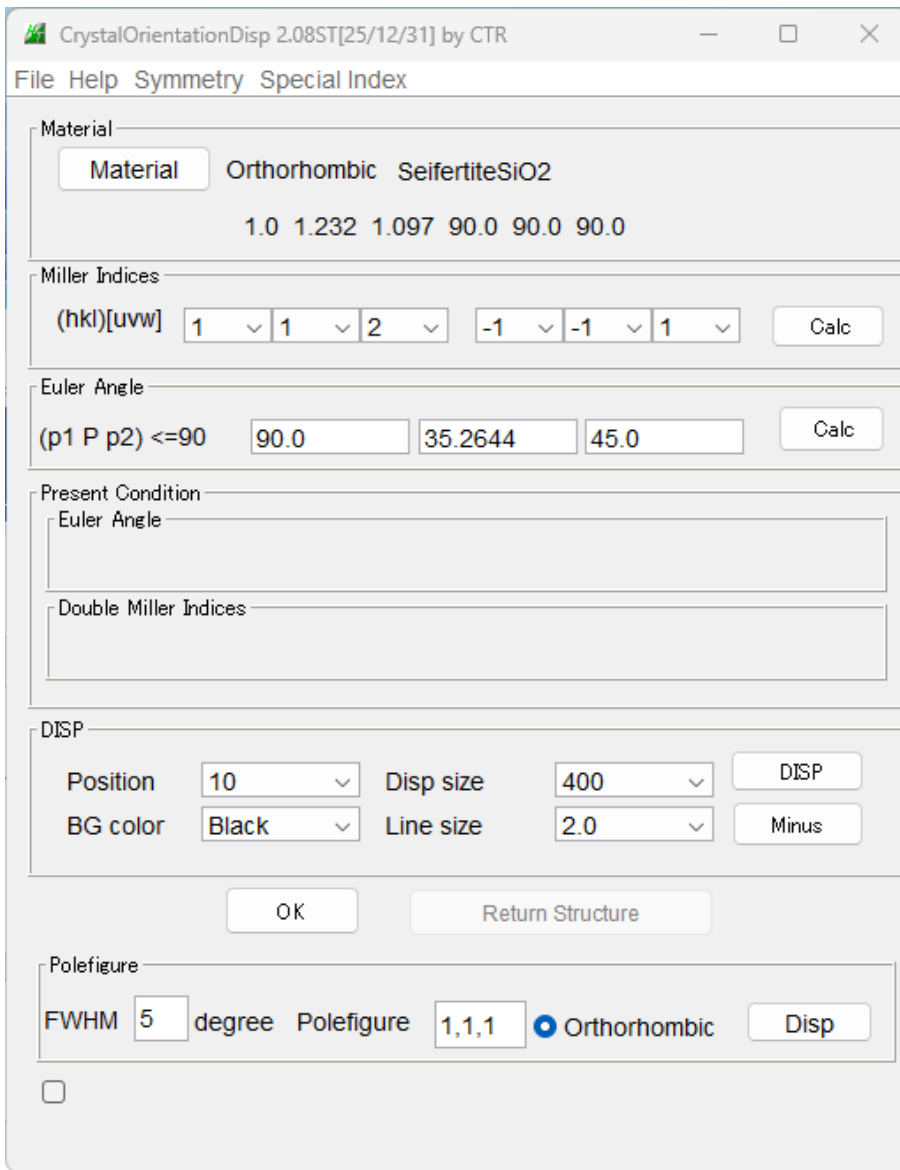
	Fwhm	Retio	Select	
 C:\CTR\work\MYICDD\SeifertiteSiO2.TXT	0.1	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>	Disp
	0.1	1.0	<input type="checkbox"/>	Disp
	0.1	1.0	<input type="checkbox"/>	Disp
	0.1	1.0	<input type="checkbox"/>	disp
	0.1	1.0	<input type="checkbox"/>	Disp

Cu K12 Gaussian/Lorentzian<1 0.5 FWHM Retio 0.8 Angle area 5.0 90.0 Step 0.02

Initialize Calc 100 cps Randomadd Flatrandomadd Asc file create



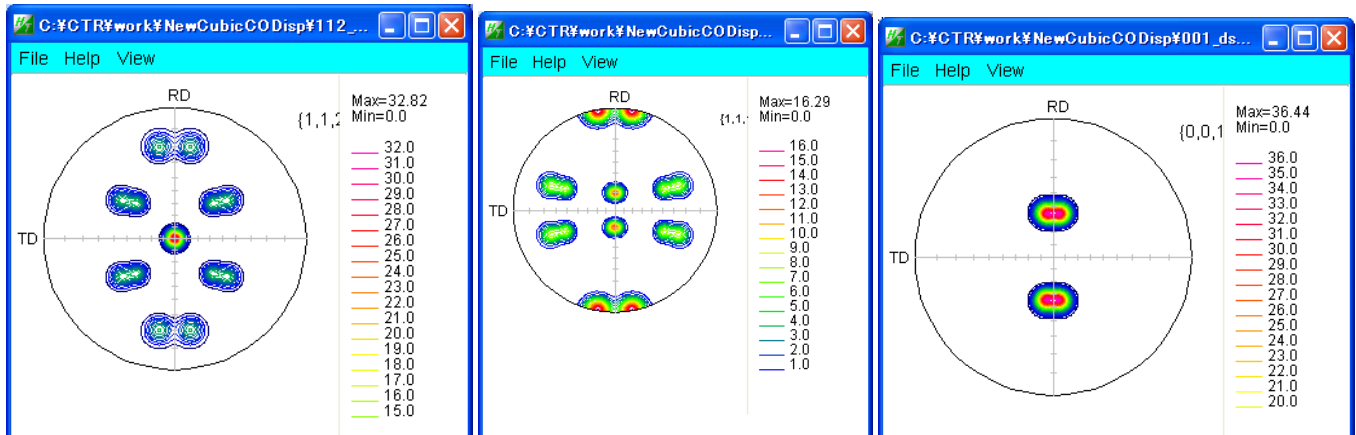
4. CTRにて方位に対する極点図の確認



{ 1 1 2 }

{ 1 1 1 }

{ 0 0 1 }



5. MTEXによるシュミレーションと比較

CS = crystalSymmetry('mmm', [4.1 5 4.5], 'mineral', 'Seifertite')

SS = specimenSymmetry('orthorhombic')

Ori1 = orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS,SS)

psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)

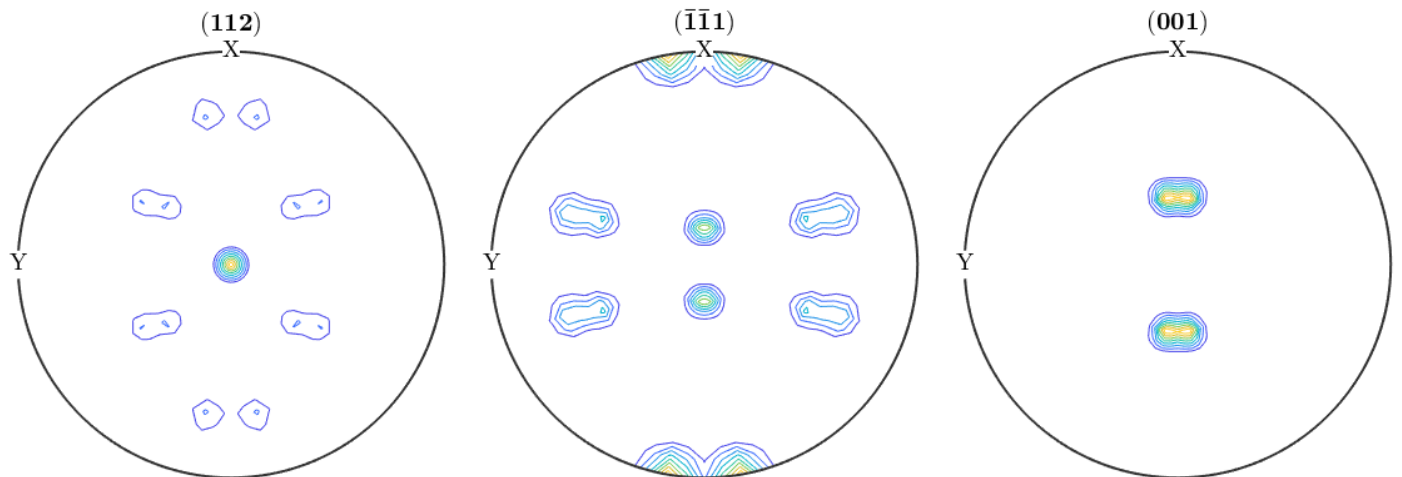
odf=unimodalODF(Ori1,psi)

h={Miller(1,1,2,CS),Miller(-1,-1,1,CS),Miller(0,0,1,CS)}

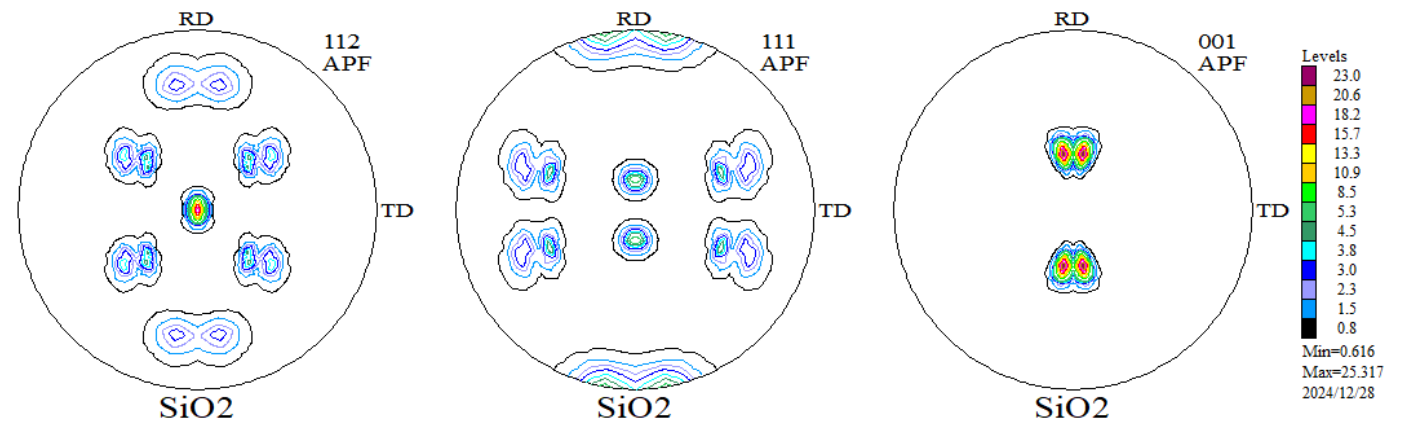
rpf=calcPoleFigure(odf,h)

plot(rpf,'contour','projection','eangle')

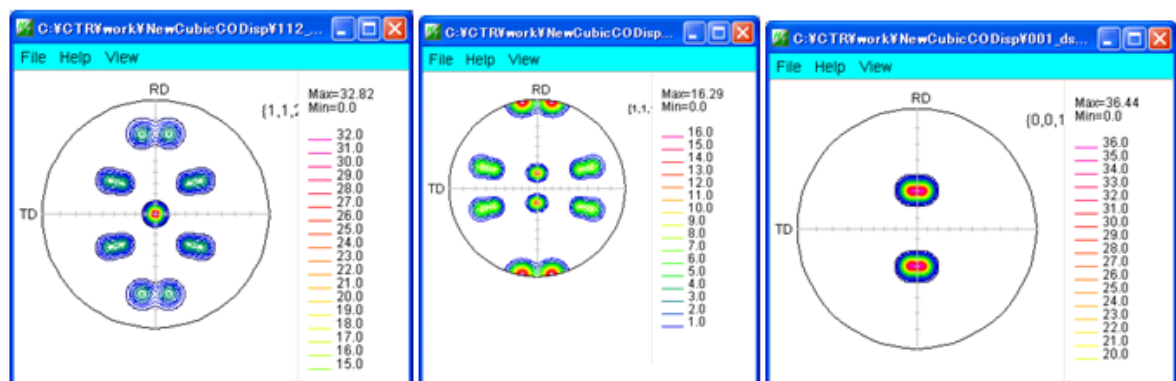
M T E X



L a b o T e x



C T R (FWHM=5degで作成)



6. 手入力によるData Base作成

登録されているData Baseを変更し、異なる名称で登録を行う。

The screenshot shows the 'Create Material data' dialog box in the MaterialDataManual Free 1.03 by CTR software. The interface includes the following fields and options:

- Material name(File name):** SeifertiteSiO2.TXT
- Crystal:** Orthorhombic (with a 'New' button)
- Lattice constant:**
 - a axis: 4.097
 - b axis: 5.0462
 - c axis: 4.4946
 - α : 90.0
 - β : 90.0
 - γ : 90.0
- Input miller index(3 Axis) & I / I₀:**
 - Example: 1 1 1 100.0
 - Between the data (tab):

1	1	0	68.63	3.1807
1	1	1	100.0	2.5963
0	2	0	4.09	2.5231
0	0	2	4.0	2.2473
0	2	1	6.78	2.2001
1	0	2	31.1	1.9703
1	2	1	60.72	1.9383
- Wave length:** 1.54056 (with a dropdown arrow)
- LaboTex(a<=b<=c α <=90 β <90 γ <=90)
-
- Chemical Formula:** SiO2
- cif:**
 - Button: cif
 - _symmetry_space_group_name_H-M: Pbcn
 - _symmetry_Int_Tables_number: 60
 - symmetry: 22
 - Button: Set
- Buttons: Disp, Cancel, Return structure, Modification
- Empty text input field at the bottom.