

# ODF解析によるeuler角度範囲の分類

2022年04月20日

*HelperTex Office*

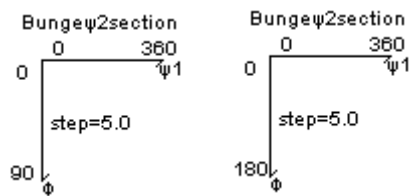
## 概要

LaboTeX, MTEXでは、ODF解析時のeuler角度範囲が定義されています。  
LaboTeXではintroduction.pdfで説明されています。

### 1.6. Basic ranges of ODF. LaboTeX structure code.

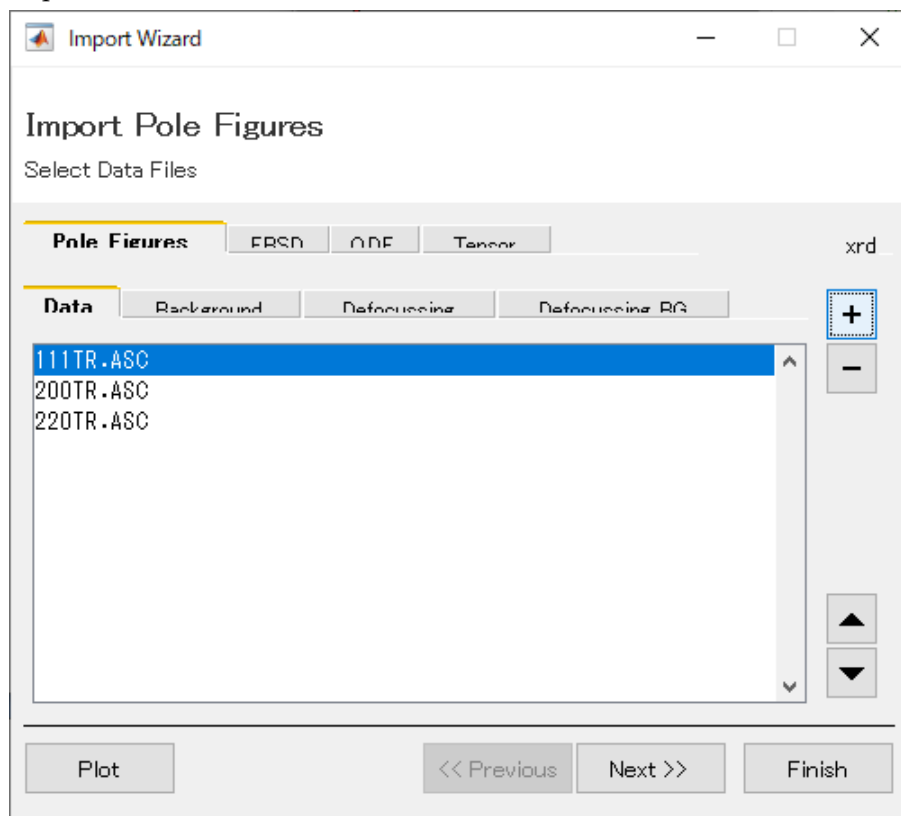
LaboTeX shows ODF in a reduced basic range. The Euler angle space can be reduced due to the crystal and sample symmetries. The boundaries of the basic range of ODF in the Euler space and symmetry structure code used in LaboTeX are collected in table below:

Symmetry	Cubic**		Hexagonal		Tetragonal		Trigonal		Ortho- rhombic	Mono- clinic	Triclinic
	O	T	D <sub>6</sub>	C <sub>6</sub>	D <sub>4</sub>	C <sub>4</sub>	D <sub>3</sub>	C <sub>3</sub>	D <sub>2</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>1</sub>
LaboTeX structure code	7	6	11	10	5	4	9	8	3	2	1
$\phi_1$	triclinic* (C <sub>1</sub> )	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°
	monoclinic* (C <sub>2</sub> )	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°
	orthorhombic*(D <sub>2</sub> )	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°
	axial*	***	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$\Phi$	90°	90°	90°	180°	90°	180°	90°	180°	90°	180°	180°
$\phi_2$	90°	180°	60°	60°	90°	90°	120°	120°	180°	180°	360°

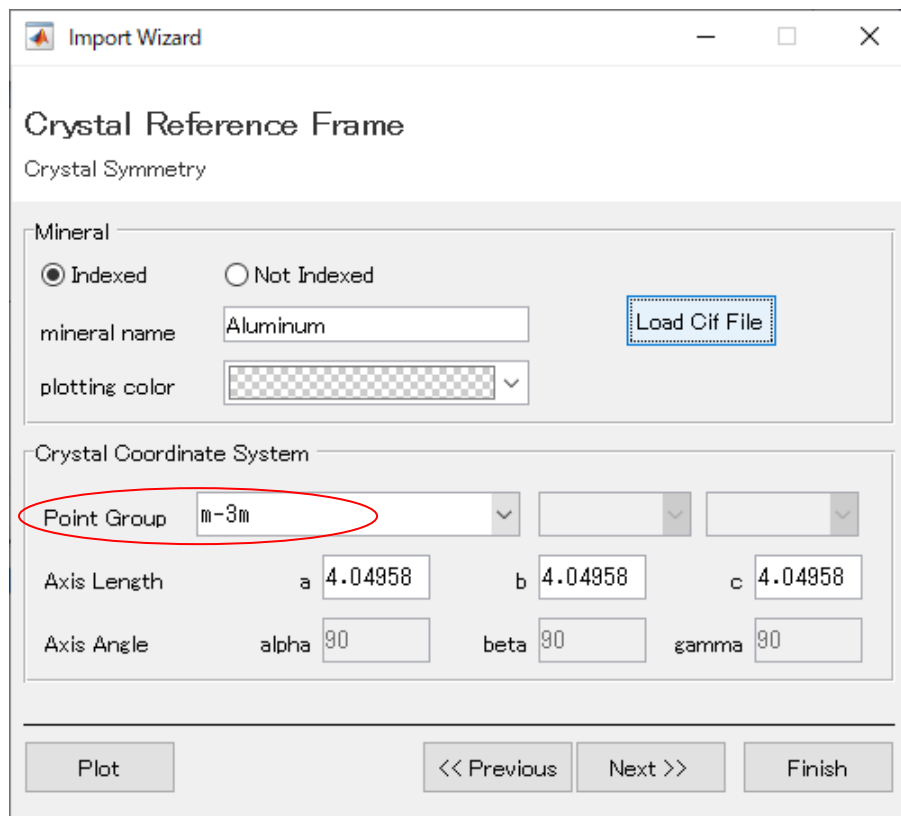


この定義と同じものをMTEXで探してみます。

Import\_wizardにて極点図とcifを指定しています。



A1のcifを指定でPoint Groupが指定されます。



結果として

```
% crystal symmetry
CS = crystalSymmetry('m-3m', [4 4 4], 'mineral', 'Aluminum');
```

CrystalSymmetryによりeuler角度範囲が決まります。

MTEXのcrystalSymmetry関係のmファイル

geometry/@crystalSymmetry/crystalSymmetry.m

% Supported Symmetries

% id	crystal system	Schoen- flies	Inter- national	Laue class	Rotational axes
% 1	triclinic	C1	1	-1	1
% 2	triclinic	Ci	-1	-1	1
% 3	monoclinic	C2	211	2/m11	211
% 4	monoclinic	Cs	m11	2/m11	211
% 5	monoclinic	C2h	2/m11	2/m11	211
% 6	monoclinic	C2	121	12/ml	121
% 7	monoclinic	Cs	1m1	12/ml	121
% 8	monoclinic	C2h	12/ml	12/ml	121
% 9	monoclinic	C2	112	112/m	112
% 10	monoclinic	Cs	11m	112/m	112
% 11	monoclinic	C2h	112/m	112/m	112
% 12	orthorhombic	D2	222	mmm	222
% 13	orthorhombic	C2v	2mm	mmm	222
% 14	orthorhombic	C2v	m2m	mmm	222
% 15	orthorhombic	C2v	mm2	mmm	222
% 16	orthorhombic	D2h	mmm	mmm	222
% 17	trigonal	C3	3	-3	3
% 18	trigonal	C3i	-3	-3	3
% 19	trigonal	D3	321	-3m1	321
% 20	trigonal	C3v	3m1	-3m1	321
% 21	trigonal	D3d	-3m1	-3m1	321
% 22	trigonal	D3	312	-31m	312
% 23	trigonal	C3v	31m	-31m	312
% 24	trigonal	D3d	-31m	-31m	312
% 25	tetragonal	C4	4	4/m	4
% 26	tetragonal	S4	-4	4/m	4
% 27	tetragonal	C4h	4/m	4/m	4
% 28	tetragonal	D4	422	4/mmm	422
% 29	tetragonal	C4v	4mm	4/mmm	422
% 30	tetragonal	D2d	-42m	4/mmm	422
% 31	tetragonal	D2d	-4m2	4/mmm	422
% 32	tetragonal	D4h	4/mmm	4/mmm	422
% 33	hexagonal	C6	6	6/m	6
% 34	hexagonal	C3h	-6	6/m	6
% 35	hexagonal	C6h	6/m	6/m	6
% 36	hexagonal	D6	622	6/mmm	622
% 37	hexagonal	C6v	6mm	6/mmm	622
% 38	hexagonal	D3h	-62m	6/mmm	622
% 39	hexagonal	D3h	-6m2	6/mmm	622
% 40	hexagonal	D6h	6/mmm	6/mmm	622
% 41	cubic	T	23	m-3	23
% 42	cubic	Th	m-3	m-3	23
% 43	cubic	O	432	m-3m	432
% 44	cubic	Td	-43m	m-3m	432
% 45	cubic	Oh	m-3m	m-3m	432

cubicでは、LaboTexのTとO

MTEXでは、23と432

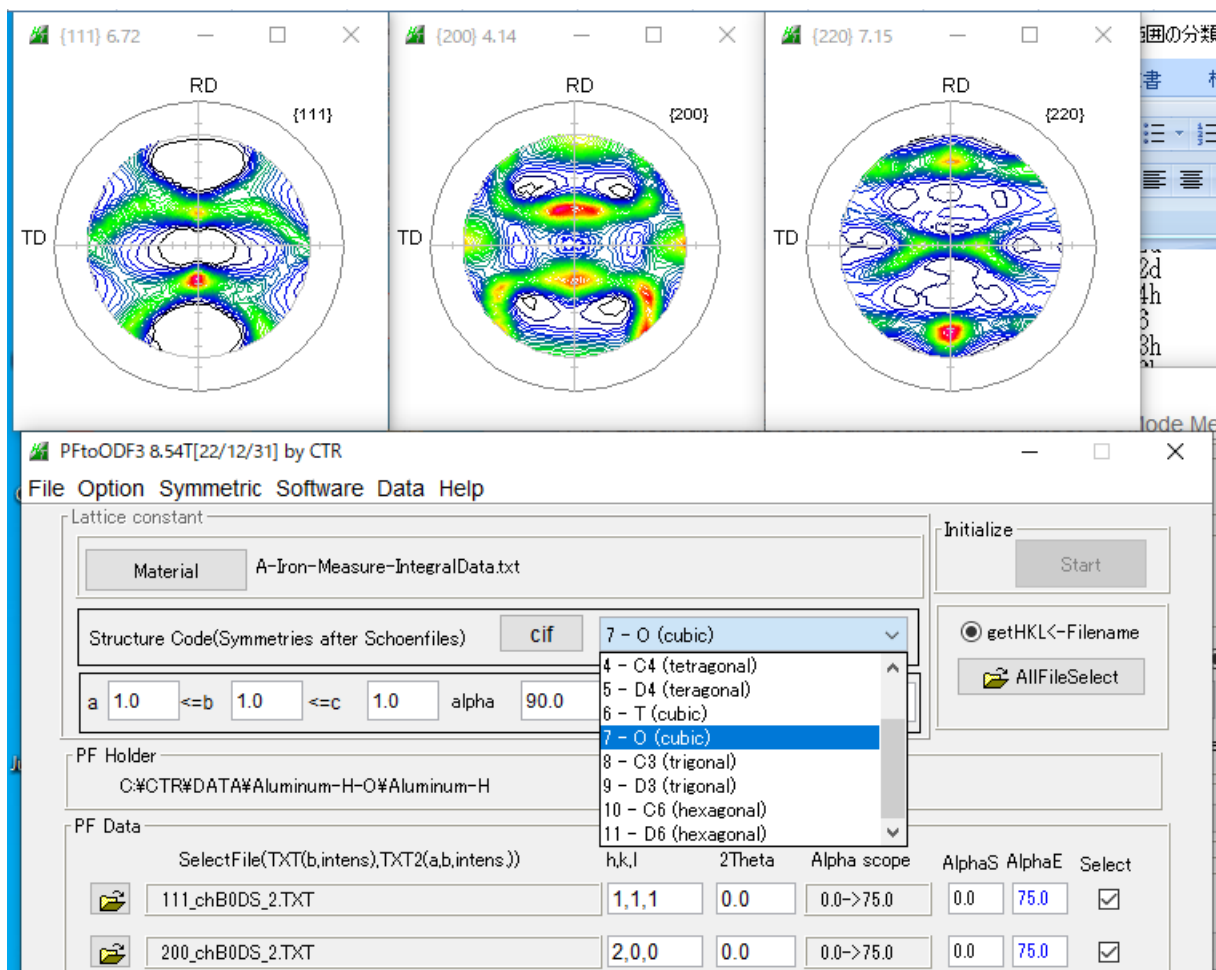
に分類されている。

## LaboTexの場合

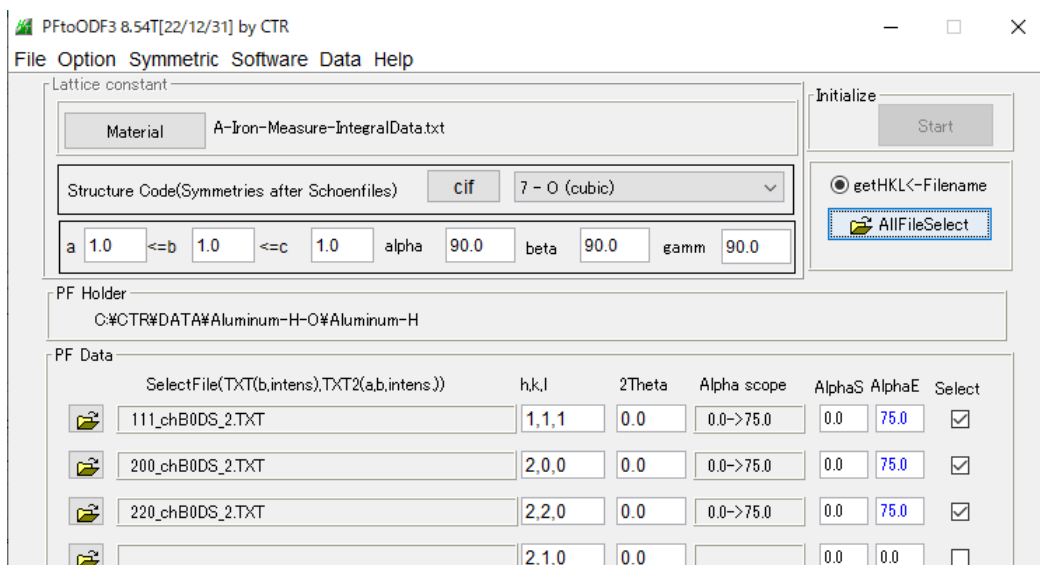
極点図入力の際、PFtoODF3ソフトウェアでLaboTex用EPFファイルを作成

### 手動変換

Materialで物質を選択、Materialに登録されていない場合、手入力する。

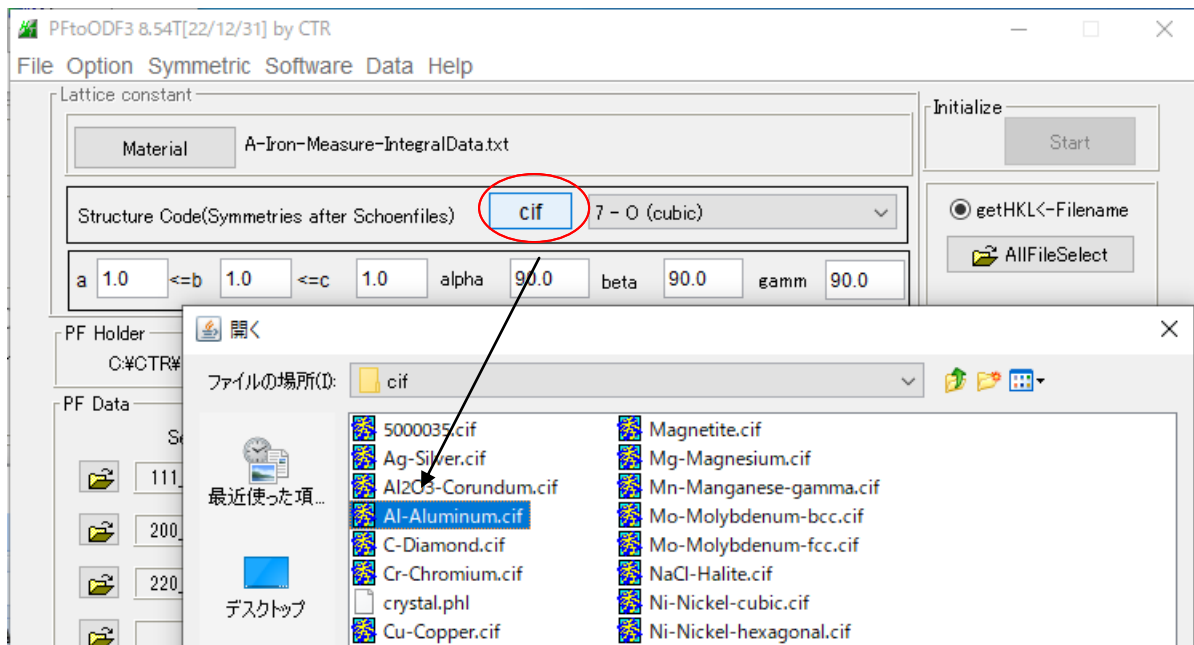


### cifによる自動変換

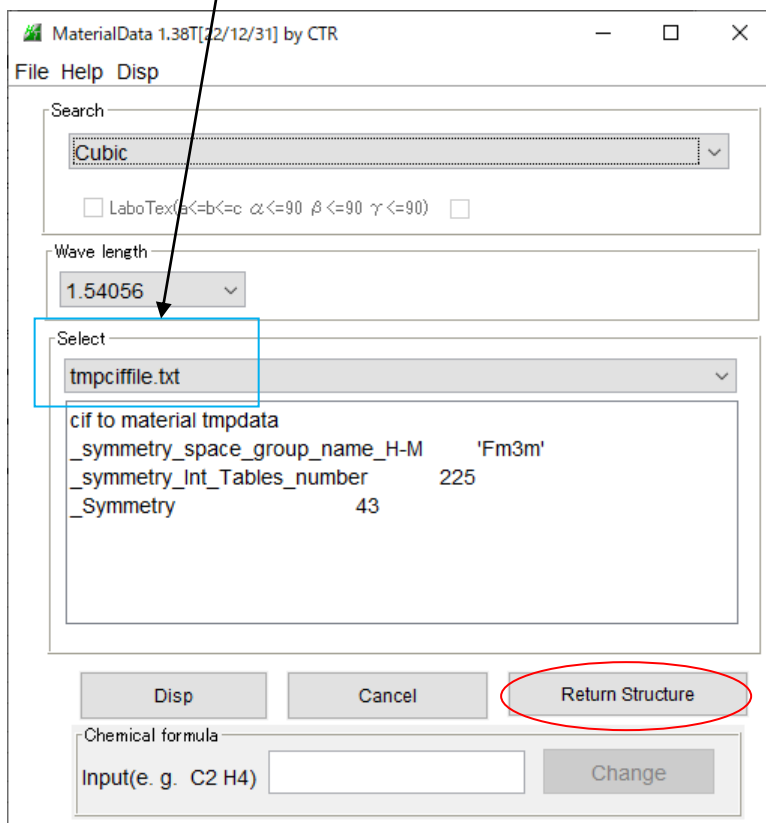


通常はMaterialで対象物質を選択するが、cifの場合、cifからMaterialフォーマットに変換し読み込みます。

## cif の選択



## Material フォーマットに変換し表示



仮の Material ファイルで読み込まれます。

