

Hexagonal、Trigonal変換

HexatoTrigoConverter

Ver.1.00M

2016年08月31日

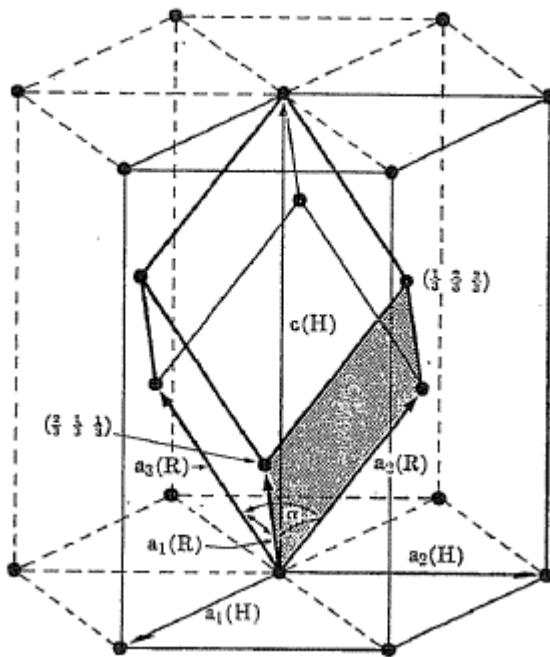


HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

概要

六方晶から斜方晶変換を実現する。



斜方晶を (h k l)、六方晶を (H K L) とした場合

$$H = h - k$$

$$K = k - l$$

$$L = h + k + l$$

もし、斜方晶であるなら

$-H + K + L = 3n$ であり、 n は整数である。

もし、3の倍数でなければ、斜方晶ではなく六方晶である。

$$h = (2 * H + K + L) / 3$$

$$k = (-H + K + L) / 3$$

$$l = (-H - 2K + L) / 3$$

格子定数 $a_r = s q r t (3 * a_H^2 + c^2) / 3$

$$\sin \alpha / 2 = 3 / (2 * s q r t (3 + (c / a_H)^2))$$

c / a が 2.45 の場合、 $\alpha = 60$ 度で格子は面心立方になる。

変換データの作成

Trigonal結晶をHexagonal結晶として表現されているケースが多い。

このような結晶をHexagonalとしてデータベースに登録する。

格納場所は、c:\CTR\Work\HexagonalTrigonalChanger\DATA

データの拡張子は".TXT"

登録されているデータは

C:\CTR\Work\HexagonalTrigonalChanger\DATA\Samrium.txt

Samarium

4

← Hexagonal (Trigonal=3)

3.6291

3.6291

26.2030

90.0

90.0

120.0

1.54059

1 0 1

0 1 2

0 0 9

1 0 4

0 1 5

1 0 7

0 1 8

1 0 10

0 1 11

1 1 0

1 0 13

0 1 14

1 1 9

2 0 5

1 0 16

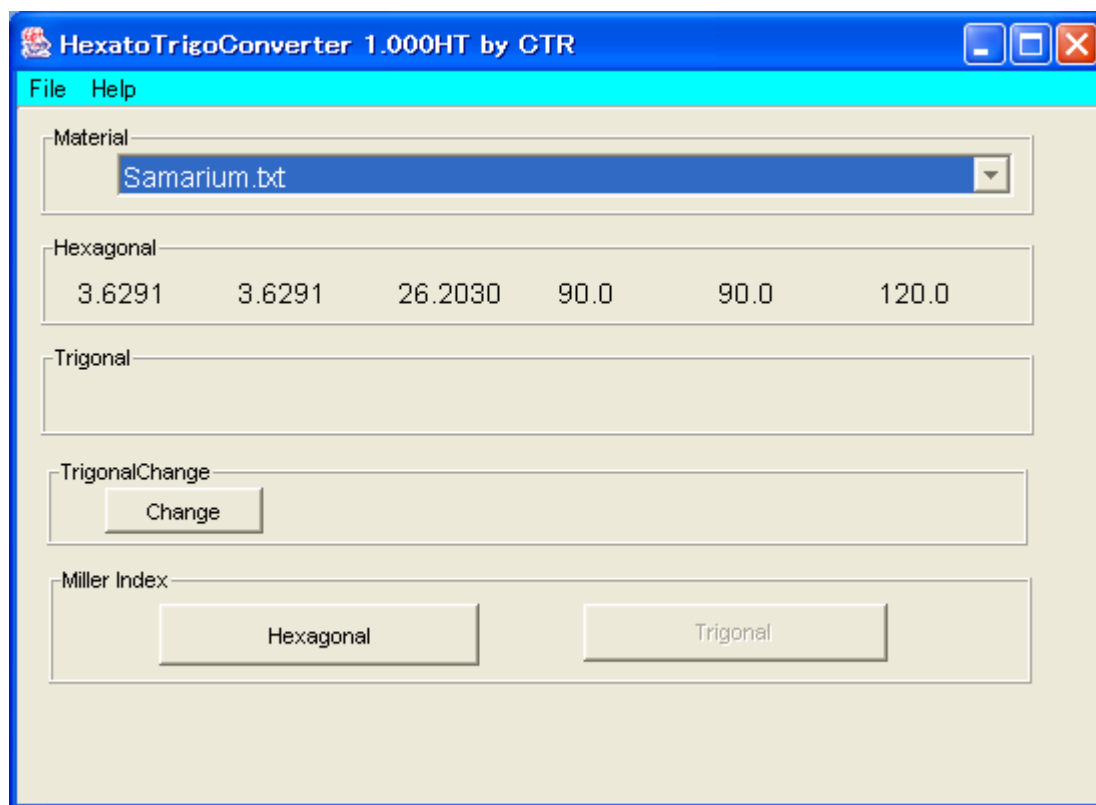
ファイル名にスペースを使用しない事

- $H+K+L=3*n$ が成り立たないデータは入力出来ません。

ソフトウェアの使い方

起動

C:\¥CTR¥bin¥HexatoTriogoConverter.java



データ表示

File
Edit
End
Samarium
4
3.6291
3.6291
26.2030
90.0
90.0
120.0
1.54059
1 0 1
0 1 2
0 0 9
1 0 4
0 1 5
1 0 7
0 1 8
1 0 10
0 1 11
1 1 0
1 0 13
0 1 14
1 1 9
2 0 5
1 0 16

選択されている物質の格子定数の表示

Material
Samarium.txt

Hexagonal
3.6291 3.6291 26.2030 90.0 90.0 120.0

Trigonal変換

TrigonalChange
Change

Change
で変換した格子定数の表示

Trigonal
8.9821 8.9821 8.9821 23.31 23.31 23.31

Indexの確認

Miller Index
Hexagonal Trigonal

Hexagonal
は入力データ

```
SamariumHEXAGO
4
3.6291
3.6291
26.2030
90.0
90.0
120.0
1.54059
1 0 1 28.582
0 1 2 29.197
0 0 9 30.683
1 0 4 31.548
0 1 5 33.212
1 0 7 37.329
0 1 8 39.714
1 0 10 45.007
0 1 11 47.877
1 1 0 50.239
1 0 13 54.002
0 1 14 57.242
1 1 9 60.028
2 0 5 61.56
1 0 16 64.062
```

SamariumTRIGO

3

8.9821

8.9821

8.9821

23.31

23.31

23.31

1.54059

1	0	0	28.582
---	---	---	--------

1	1	0	29.197
---	---	---	--------

3	3	3	30.684
---	---	---	--------

2	1	1	31.548
---	---	---	--------

2	2	1	33.212
---	---	---	--------

3	2	2	37.329
---	---	---	--------

3	3	2	39.714
---	---	---	--------

4	3	3	45.007
---	---	---	--------

4	4	3	47.877
---	---	---	--------

1	0	0	28.582
---	---	---	--------

5	4	4	54.002
---	---	---	--------

5	5	4	57.242
---	---	---	--------

4	3	2	60.028
---	---	---	--------

3	1	1	61.56
---	---	---	-------

6	5	5	64.063
---	---	---	--------