

ODF解析用データベース構築ツール

MaterialDataソフトウェア

Ver1.38

LaboTexではZ材料軸とc結晶軸を一致させる事や、格子定数の大小関係を厳密に規定されている。この変換を一々カードを見ながら変換するのは面倒である。そこで、一度解析を行ったデータを登録し、変換を行う手段を提供します。

2021年01月12日



HelperTex Office

- * Ver.1.100 2010-08-29 Comment を追加
- * Ver.1.101 2010-09-01 WordPad 追加及びバグ修正
- * Ver.1.104 2010/10/01 PFTtoODF3 と連動
- * Ver.1.105 2010/10/04 MYICDD が存在している場合、デフォルトデータ作成しない
- *Ver1.21X 2012/06/11 新しい管理に移行
- *Ver1.22X 2012/08/18 Hexgonal と Trigonal を分類
- *Ver1.24X 2013/06/20 異常データを読み飛ばす
- *Ver1.25X 2013/06/22 MYICDD が存在しない場合の初期データの修正
- *Ver1.26X 2013/09/15 Trigonal の復活
- *Ver1.27X 2013-10-05 Tetra body->Face 変換サポート
- * Ver1.28X 2013-10-29 MaxHKL を可変、getdvalue(h,k,l);のmaxにし、getnewhkl(d);に対応
- * Ver1.29X 2013-11-18 Monoclinic caxis 変換で(-k)が間違っている(k)に変更
- *Ver1.30X 2013-12-12 Monoclinic の変更点元に戻す。2θ角度が異なるため
- *Ver1.31X 2013-12-12 Disp に d-value 追加
- *Ver1.32X 2013-12-23 PFTtoODF3 などから call され選択した material を次回に表示する変更
- *Ver1.33X 2013-02-18 Icon 変更
- * Ver1.34X 2015-12-30 $a \leq b \leq c$ 表示
- * Ver1.35X 2016/01/12 DISP ファイルの先頭をファイル名に書き換え
- *Ver1.36SK 2018/11/29 選択されている波長を表示
- *Ver1.37 2019/09/20 カードに化学式を追加編集を可能に (吸収補正のため)
- *Ver1.38 2021/01/12 空間群表示

概要

L a b o T e x では、orthorhombic,tetragonal,monoclinic,triclinic は特殊な表現を採用している。
この変換は煩雑なので、データを登録すれば、変換表示を行う事が可能になる。

データ登録

登録はプログラムではサポートされていません。エディッタを用いてください。

I C D D データから変換する場合、MakeMyICDD ソフトウェアで対応

データ登録場所

C:¥CTRY¥Work¥MyICDD

登録形式

T X T データ

1 行 物質名

2 行 CrystalSystemNo (0:Cubic 1:tetoragonal 2:orthorhombic 3:rhombohederal or trigonal
4:hexagonal 5:monoclinic 6:triclinic)

3 行 a

4 行 b

5 行 c

6 行 α

7 行 β

8 行 γ

9 行 波長

1 0 行 h k l 登録数

1 1 行 以下 h k l データ (h k l 相対強度 2 θ 角度)

最後の行 コメント

例

A-Iron

0

2.8664

2.8664

2.8664

90.0

90.0

90.0

1.54056

6

1 1 0 100.0 44.673

2 0 0 20.0 65.021

2 1 1 30.0 82.333

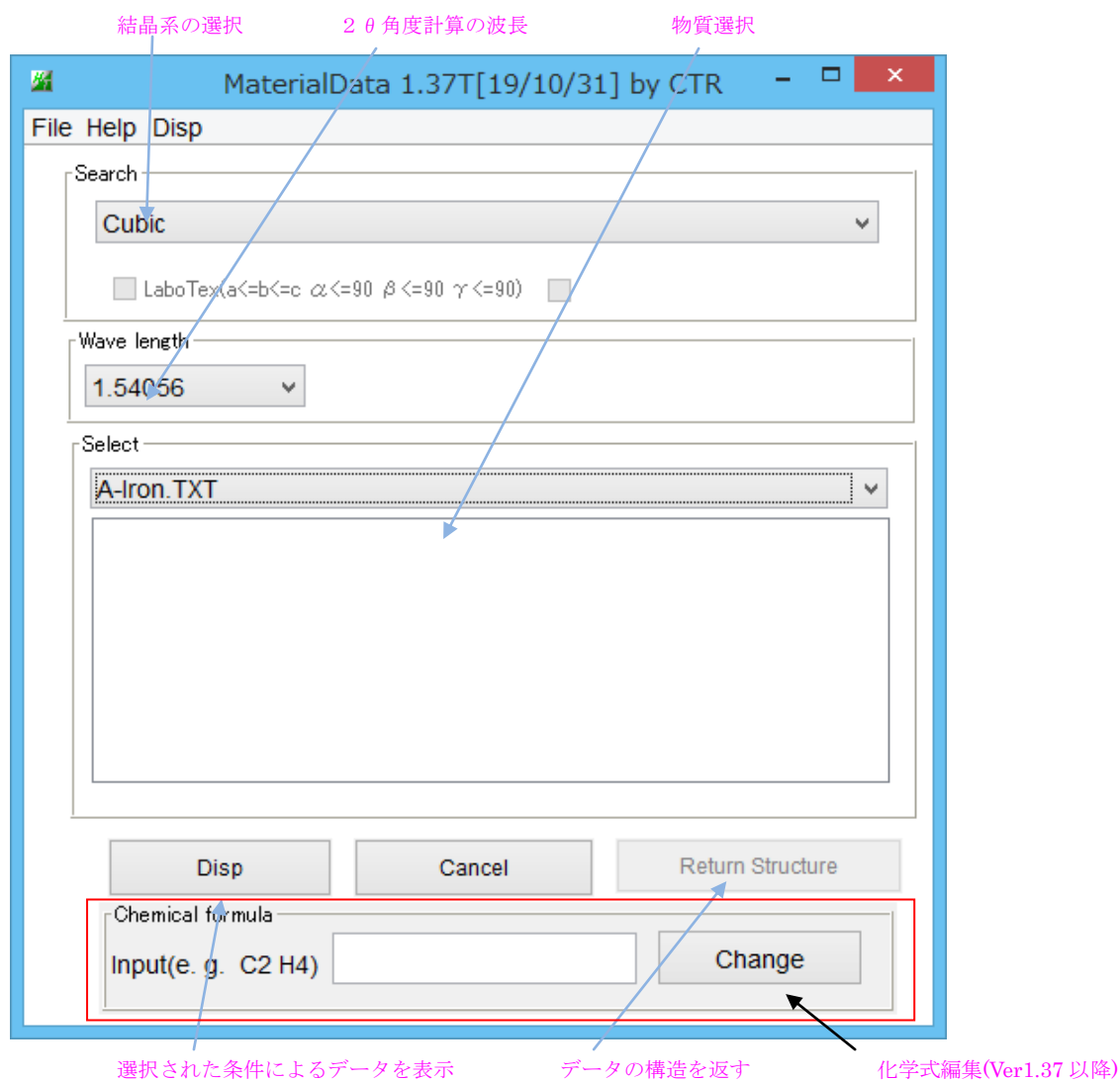
2 2 0 10.0 98.945

3 1 0 12.0 116.385

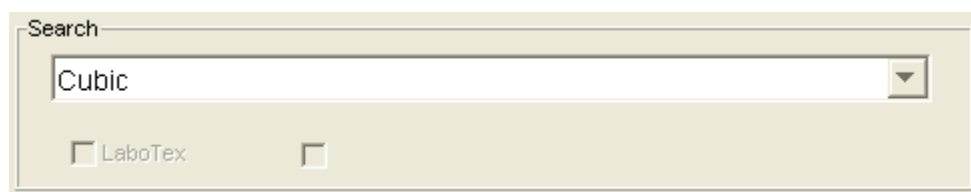
2 2 2 6.0 137.136

プログラムの使用法

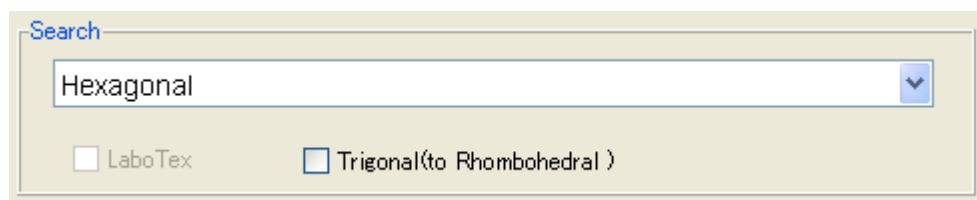
起動 `c:\CTR\bin\MaterialData.jar`



検索条件



結晶系を選択、結晶系によってはL a b o T e x 特有な表現になる場合、
h e x a g o n a l を選択の場合



LaboTex Trigonal(to Rhombohedral) のチェックが可能になります。

Trigonal 系で Hexagonal 表記されている場合、Trigonal->Rhombohedral 変換し表示する。

Trigonal で Hexagonal 表記の例 (Al₂O₃)

Trigonal(to Rhombohedral)

Check をしないで Disp は Trigonal で表示される。

AluminumOxideDISP

Trigonal

4.7588	(1.0)				
4.7588	(1.0)				
12.992	(2.7301)				
90.0					
90.0					
120.0					
1.54056					
30					
0	1	2	70.0	25.576	
1	0	4	97.0	35.15	
1	1	0	42.0	37.777	
0	0	6	1.0	41.677	
1	1	3	100.0	43.354	
~	~	~	~	~	~

Trigonal(to Rhombohedral)

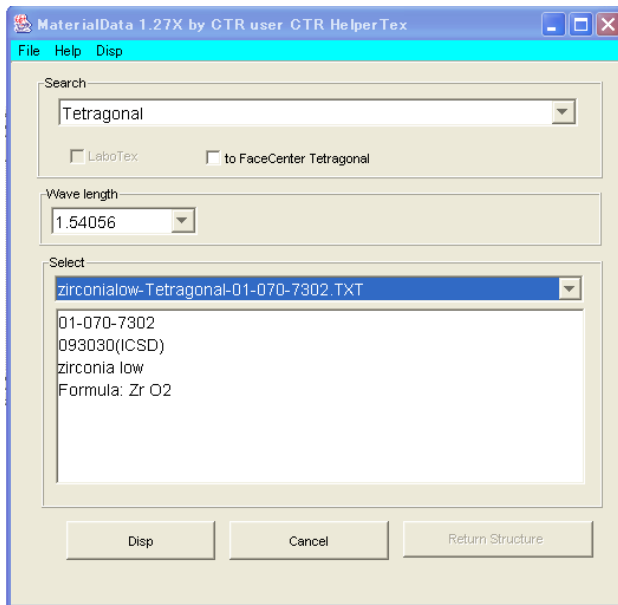
に check をして表示では Rhombohedral 表記される。

AluminumOxideDISP

Rhombohedral or Trigonal

5.1287	(1.0)				
5.1287	(1.0)				
5.1287	(1.0)				
55.2832					
55.2832					
55.2832					
1.54056					
30					
1	1	0	70.0	25.576	
2	1	1	97.0	35.15	
1	0	-1	42.0	37.777	
2	2	2	1.0	41.677	
2	1	0	100.0	43.354	

Tetragonal の例



to FaceCenter Tetragonal の場合

zirconialow-01-070-7302DISP

Tetragonal

3.5781 (1.0)

3.5781 (1.0)

5.1623 (1.4427)

90.0

90.0

90.0

1.54056

42

1	0	1	100.0	30.369
---	---	---	-------	--------

0	0	2	28.8	34.726
---	---	---	------	--------

1	1	0	13.3	35.45
---	---	---	------	-------

1	0	2	1.3	43.181
---	---	---	-----	--------

to FaceCenter Tetragonal の場合

zirconialow-01-070-7302DISP

Tetragonal

5.0602 (1.0)

5.0602 (1.0)

5.1623 (1.0202)

90.0

90.0

90.0

1.54056

42

1	1	1	100.0	30.369
---	---	---	-------	--------

0	0	2	28.8	34.726
---	---	---	------	--------

2	0	0	13.3	35.45
---	---	---	------	-------

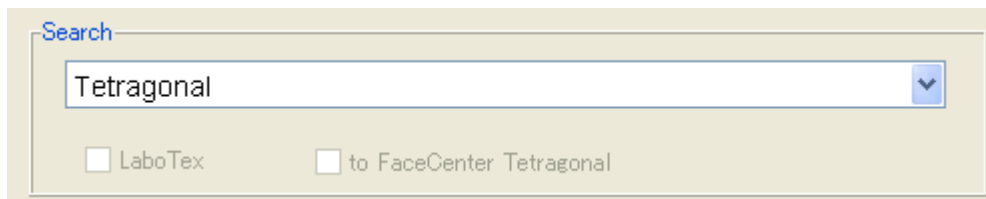
1	1	2	1.3	43.181
---	---	---	-----	--------

格子定数 a 軸を $\sqrt{2}$ 倍して指数付けを行っています。

Tetragonal は特例

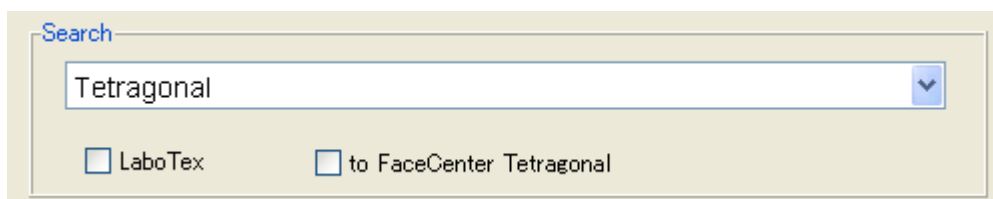
Tetragonal には面心正方晶は存在しない。理由は $a/\sqrt{2}$ すれば体心正方晶に変換出来る
しかし、面心正方晶で解析すると便利な事があるので、体心→面心変換をサポートしている。
各種ソフトウェアから利用されているので注意が必要になる。

Tetragonal B to F ソフトウェアでは、

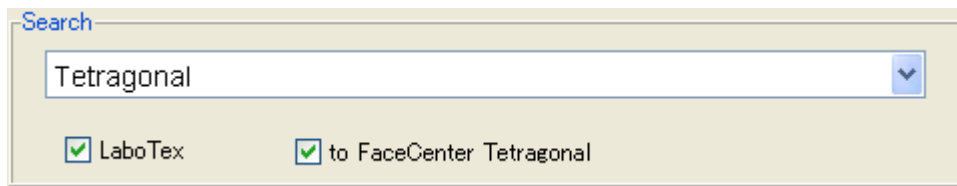


で、体心→面心変換は機能しない。

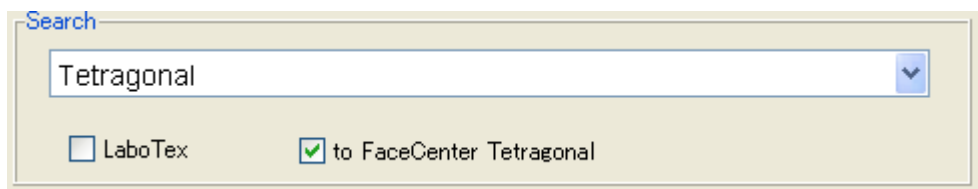
PFtoODF3 ソフトウェアでは、



体心→面心変換は機能し、LaboTex も機能する。

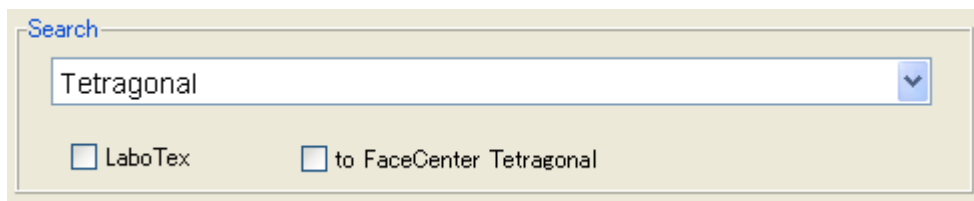


LaboTex と体心→面心が選択されている場合、PFtoODF3 の指数を体心→面心変換が行われる。



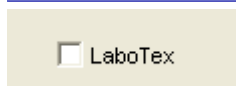
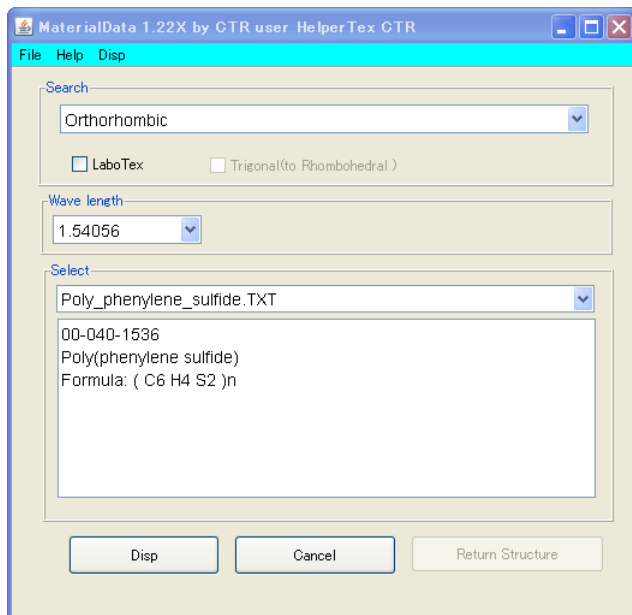
LaboTex が選択されていない場合、PFtoODF3 の指数変換は行われない。

他のソフトウェアの場合



LaboTex は選択出来るが機能していません。

Orthorhombic の例



check しないで d i s p

Poly_phrnylene-sulfideDISP

Orthorhombic

8.67 (1.0)
 5.61 (0.6471)
 10.26 (1.1834)
 90.0
 90.0
 90.0
 1.54056
 10

1	1	0	25.0	18.825
2	0	0	100.0	20.47
1	1	2	16.0	25.655



check して d i s p

Poly_phrnylene-sulfideDISP

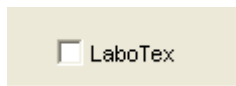
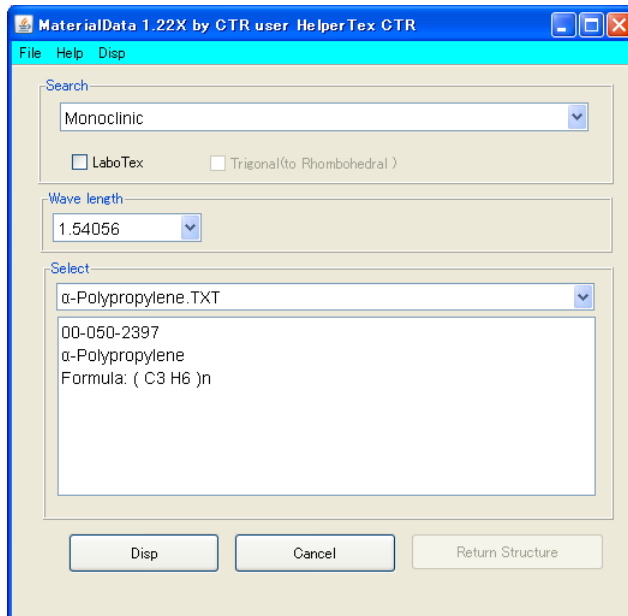
Orthorhombic

5.61 (1.0)
 8.67 (1.5455)
 10.26 (1.8289)
 90.0
 90.0
 90.0
 1.54056
 10

1	1	0	25.0	18.825
0	2	0	100.0	20.47
1	1	2	16.0	25.655

a < b < c に変換される。

Monoclinic の例



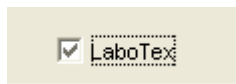
checkしないでdisp

PolypropyleneDISP

Monoclinic

6.63 (1.0)
 20.78 (3.1342)
 6.5 (0.9804)
 90.0
 99.5
 90.0
 1.54056
 13

0	2	0	2.6	8.503
1	0	0	1.2	13.53
1	1	0	100.0	14.187



checkしてdisp

α-PolypropyleneDISP

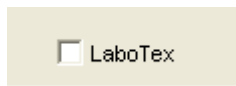
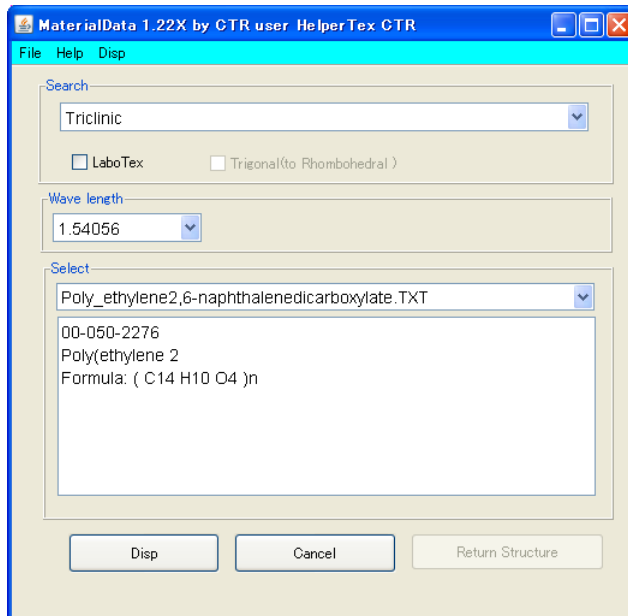
Monoclinic

6.5 (1.0)
 6.63 (1.02)
 20.78 (3.1969)
 90.0
 90.0
 80.5
 1.54056
 145

0	0	2	2.6	8.503
0	-1	0	1.2	13.53
0	-1	1	100.0	14.187
0	0	4	54.0	17.054

$a < b < c$ $\gamma < 90$ に変換される。

Triclinic の例

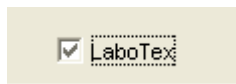


check しないで D i s p

Polyethylene2_6_naphthalenedicarboxylateDISP

Triclinic

6.624	(1.0)			
5.763	(0.87)			
13.244	(1.9994)			
81.97				
144.71				
99.69				
1.54056				
17				
0	0	1	25.4	11.556
-1	0	2	3.8	14.208
0	1	0	95.1	15.586



check して D i s p

Polyethylene2_6_naphthalenedicarboxylateDISP

Triclinic

5.763	(1.0)			
6.624	(1.1494)			
13.244	(2.2981)			
35.29				
81.97				
80.31				
1.54056				
17				
0	0	1	25.4	11.556
0	1	2	3.8	14.208
1	0	0	95.1	15.586

$a < b < c$ $\gamma < 90$ に変換される。