ODF解析用データベース構築ツール

MaterialDataソフトウエア

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。



- * Ver.1.100 2010-08-29 Comment を追加 * Ver.1.101 2010-09-01 WordPad 追加及びバク修正 * Ver.1.104 2010/10/01 PFtoODF3 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 2013-11-18 Monoclinic caxis 変換で(-k)が間違っている(k)に変更 * Ver1.29X 2013-12-12 Monoclinic の変更点元に戻す。2 θ 角度が異なるため *Ver1.30X *Ver1.31X 2013-12-12 Disp に d-value 追加 *Ver1.32X 2013-12-23 PFtoODF3 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<=b<=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。

ICDDデータから変換する場合、MakeMyICDD ソフトウエアで対応

データ登録場所

 $C: \ensuremath{{\tt FCTR}} \ensuremath{{\tt W}} work \ensuremath{{\tt W}} MyICDD$

登録形式

	TXTデ	ータ			
	1行	物質名			
	2行	Crystal	SystemN	o (0:C	Cubic 1:tetoragonal 2:orthorhombic 3:rhombohederal or trigonal
				4	hexagonal 5:monoclinic 6:triclinic)
	3行	а			
	4行	b			
	5行	с			
	6行	α			
	7行	β			
	8行	γ			
	9行	波長			
	10行	h k l 登	绿数		
	11行	以下h k	1データ	/ (h	k l 相対強度 2 θ 角度)
	最後の行	コメン	イト		
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\Shin\StaterialData.jar

	Materia	Data 1.37T[19/10)/31] by CTR	- 🗆 🗙	
e Help Dis	p				
Search	/				
Cubic				~	
Odbie					
Labo	Tex(a<=b<=c a	<=90 β<=90 γ<=90) [
Wave length	[/	/		
1.54056	¥				
∟ ⊩Select ——					
A-Iron T	ХТ			~	
yr non. I	<u></u>				
		1			
	Disp	Cancel	Return St	tructure	
Chemic	Disp al formula	Cancel	Return St	tructure	
Chemic	Disp al formula c. g. C2 H4)	Cancel	Return St	tructure	
Chemic Input(e	Disp al formula e. g. C2 H4)	Cancel	Return St Char	tructure	
Chemic Input(e	Disp al formula e. g. C2 H4)	Cancel	Return St Char	tructure	

検索条件

Search	h		
Cu	ıbic		•
	LebeTev	-	
- I	Laborex		

結晶系を選択、結晶系によってはLaboTex特有な表現になる場合、 hexagonalを選択の場合

Search	
Hexagonal	✓
LaboTex	Trigonal(to Rhombohedral)
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->Rhombohrderal 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	
<u>^</u>	<u>^</u>	<u>^</u>	· ~	10 170	

🗹 Trigonal(to Rhombohedral)

に check をして表示では Rhombohedral 表記される。

Aluminu	AluminumOxideDISP				
Rhombo	ohedral or Trig	onal			
5.1287	(1.0)				
5.1287	(1.0)				
5.1287	(1.0)				
55.2832	2				
55.2832	2				
55.2832	2				
1.54056	6				
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

🏝 MaterialData 1.27X by CTR user CTR HelperTex 📃 🗖 🕽
File Help Disp Search Tetragonal LaboTex to FaceCenter Tetragonal Wave length 1.54056 Select zirconialow-Tetragonal-01-070-7302.TXT 01-070-7302 093030(ICSD) zirconia low Formula: Zr O2
Disp Cancel Return Structure

「 to FaceCenter Tetragonal の場合

zirconialow-01-070-7302DISP Tetragonal 3.5781 (1.0)(1.0) 3.5781 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 0 13.3 35.45 1 0 2 1 1.3 43.181

▼ to FaceCenter Tetragonal の場合

zirconialow-0	1-070-7302DI	SP		
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√2倍して打	省数付けを行っ	っています。	

Tetragonal には面心正方晶は存在しない。理由は a /√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。 各種ソフトウエアから利用されているので注意が必要になる。

TetragonalBtoFソフトウエアでは、

Search		
Tetragonal		*
LaboTex	to FaceCenter Tetragonal	

で、体心-->面心変換は機能しない。

PFtoODF3ソフトウエアでは、

Search-		
Tetragonal		~
LaboTex	to FaceCenter Tetragonal	
本心―>面心変換に	t機能し、LaboTex も機能する。	
-Search		
Tetragonal 🗸		

🗹 LaboTex	🗹 to FaceCenter Tetragonal

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。

_ ^{Se}	earch		
	Tetragonal		~
		to FaceUenter Tetragonal	

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

他のソフトウエアの場合

۲ ^{Se}	earch		
	Tetragonal		~
	LaboTex	to FaceCenter Tetragonal	

LaboTex は選択出来るが機能していません。

Orthorhombic の例

Search				
Orthorh	ombic		~	
🗌 Labol	Fex Trigona	il(to Rhombohedral)		
Wave length				
1.54056	*			
Select				
00-040-1 Poly(phe Formula:	1536 Inylene sulfide) (C6 H4 S2)n			
C Lab	oTex che	eck しないで d leDISP	isp	
E Lab Poly_phrr Orthorhor	oTex che nylene-sulfid mbic	eck しないで d leDISP	isp	
Poly_phrr Orthorhor 8.67	oTex che nylene-sulfid mbic (1.0)	eck しないで d leDISP	isp	
Poly_phrr Orthorhor 8.67 5.61 10.26 90.0 90.0 90.0 1.54056 10	oTex che nylene-sulfid mbic (1.0) (0.6471 (1.1834	eck しないでd leDISP l) l)	isp	
C Lab Poly_phrr Orthorhor 8.67 5.61 10.26 90.0 90.0 90.0 1.54056 10	oTex che nylene-sulfid mbic (1.0) (0.6471 (1.1834	eck しないで d deDISP !) 1)	isp 250	18.825
Poly_phrr Orthorhor 8.67 5.61 10.26 90.0 90.0 90.0 1.54056 10 1	oTex che nylene-sulfid mbic (1.0) (0.6471 (1.1834	eck しないで d leDISP l) 1) 1)	isp 25.0 100.0	18.825 20.47

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 2 1 16.0 25.655 1

a < b < c に変換される。

🔽 LaboTex

Monoclinic の例

		ser Helperlex CIR		
Search				
Monoclinic			<u> </u>	
🗌 LaboTex	Trigon	al(to Rhombohedral)		
Wave length				
1.54056	*			
Select				
α-Polyprop	ylene.TXT		~	
00-050-23: α-Polyprop Formula: (97 Mene C3 H6)n			
Di	isp	Cancel	turn Structure	
C Labo Polypropyle Monoclinic	rexch	eck しないでd :	isp	
Clypropyli olypropyli 1onoclinic .63	rex ch eneDISP (1.0)	eck しないでd :	isp	
Clypropyle olypropyle i.63 i.63	tex ch eneDISP (1.0) (3.134)	eck しないでd : 2)	isp	
Clypropyli Polypropyli Aonoclinic 6.63 90.78 6.5	tex ch eneDISP (1.0) (3.134) (0.9804	eck しないでd : 2) 4)	isp	
C Labo Polypropyli Aonoclinic 5.63 20.78 5.5 90.0	tex ch ch (1.0) (3.134) (0.9804	eck しないでd : 2) 4)	isp	
C Labo Polypropyli Aonoclinic 3.63 20.78 3.5 30.0 39.5	tex ch (1.0) (3.134) (0.9804	eck しないでd : 2) 4)	isp	
C Labo Polypropyli Aonoclinic 3.63 20.78 3.5 30.0 99.5 30.0	Tex ch eneDISP (1.0) (3.134) (0.9804	eck しないでd : 2) 4)	isp	
C Labo Polypropyli Aonoclinic 5.63 (0.78 5.5 90.0 99.5 90.0 54056	Tex ch eneDISP (1.0) (3.134) (0.9804	eck しないでd : 2) 4)	isp	
C Labo Polypropyla Aonoclinic 5.63 20.78 5.5 90.0 99.5 90.0 1.54056	Tex ch eneDISP (1.0) (3.134) (0.9804	eck しないでd : 2) 4)	isp	
C Labo Polypropyli Aonoclinic 6.63 20.78 6.5 00.0 99.5 90.0 .54056 3	Tex ch eneDISP (1.0) (3.134) (0.9804	eck しないでd : 2) 4)	isp	0 500
C Labo Polypropyli Aonoclinic 5.63 20.78 5.5 90.0 99.5 90.0 1.54056 3	Tex ch eneDISP (1.0) (3.134) (0.9804	eck しないでd : 2) 4)	isp 2.6	8.503
Colypropyli 1000clinic 1.63 0.78 1.5 0.0 9.5 0.0 1.54056 3	Tex ch eneDISP (1.0) (3.134) (0.9804	eck しないでd : 2) 4) 0	isp 2.6 1.2	8.503 13.53
Labo olypropyli 10noclinic .63 0.78 .5 0.0 9.5 0.0 .54056 3	Tex ch eneDISP (1.0) (3.134) (0.9804 2 0 1	eck しないでd : 2) 4) 0 0	isp 2.6 1.2 100.0	8.503 13.53 14.187

		1		
α -Polyprop	yleneDISP			
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	$\gamma < 9 0$ に変	変換される。		

Triclinic の例

🕌 MaterialData 1.22X by CTR user HelperTex CTR	
File Help Disp	
_Search	
Triclinic	~
LaboTex Trigonal(to Rhombohedral)	
Wave length	
1.54056	
- Select	
Poly_ethylene2,6-naphthalenedicarboxylate.TXT	~
Poly(ethylene 2 Formula: (C14 H10 O4)n Disp Cancel Return Struct	ure
□ LaboTex 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

🗹 LaboTex

check してDisp

Polyethylene	2_6_naphthal	enedicarboxyl	ateDISP	
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。