

T e t r a g o n a l の指数をB o d y c e n t e r からF a c e c e n t e r に変更する

T e t r a g o n a l B t o F ソフトウェア

Ver1.01M

2016年09月15日



HelperTex Office

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

概要

正方晶に置いて a 軸配向か b 軸配向を調べる場合、体心正方晶より、面心正方晶で考えたほうが分かり易い。本ソフトウェアは、体心正方晶で記述されている ICDD データを面心正方晶に書き換えるソフトウェアである。

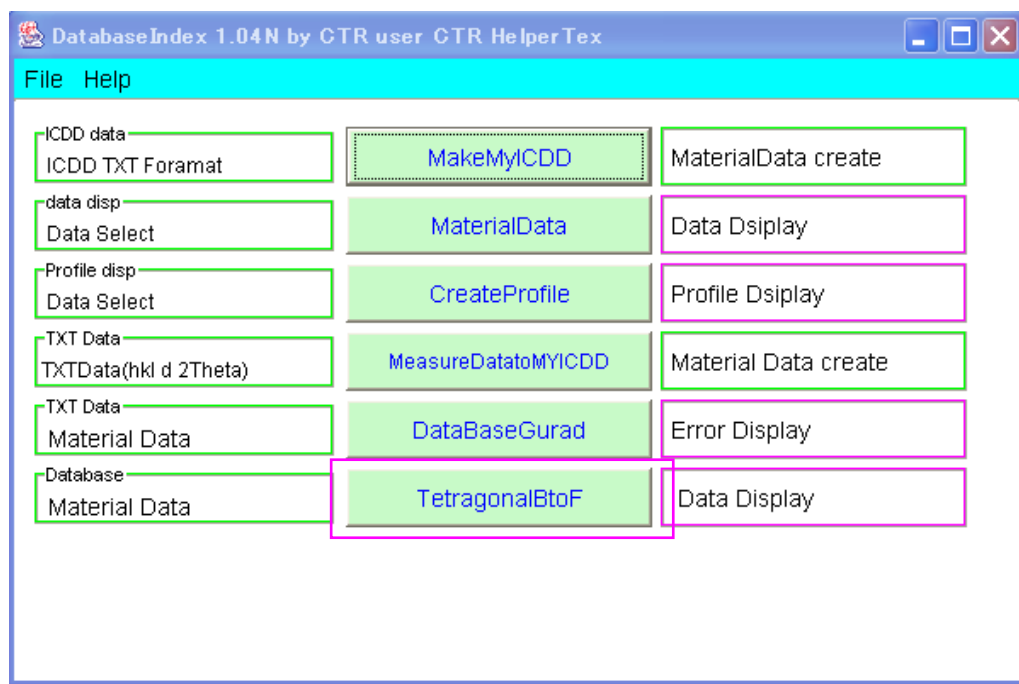
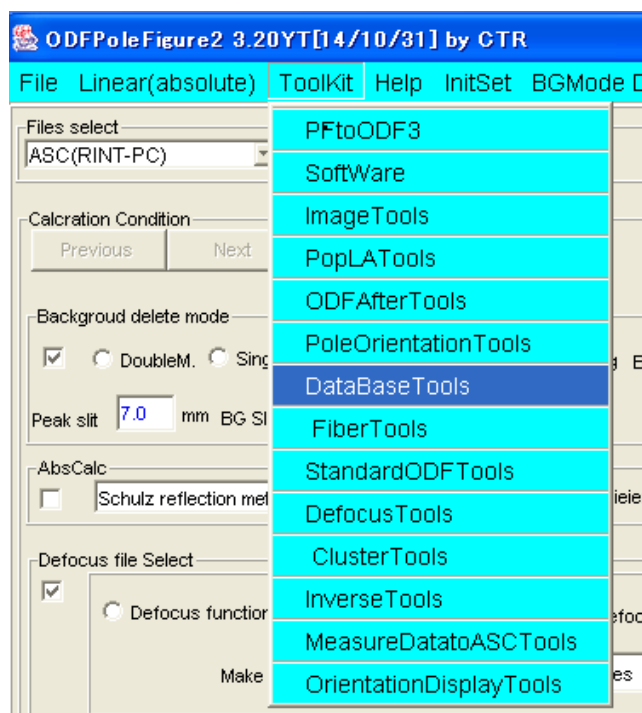
体心→面心の場合、格子定数 $a \cdot \sqrt{2}$ とし、体心正方晶の d 値になる h k l を計算することで実現している。

もし、指数付けした再計算 d 値との差が 0.001 以上の場合、
指数変換しないで指数 (0, 0, 0) とする。

ソフトウェアの起動

C:\¥CTR¥bin¥TetragonalBtoF.jar のダブルクリック

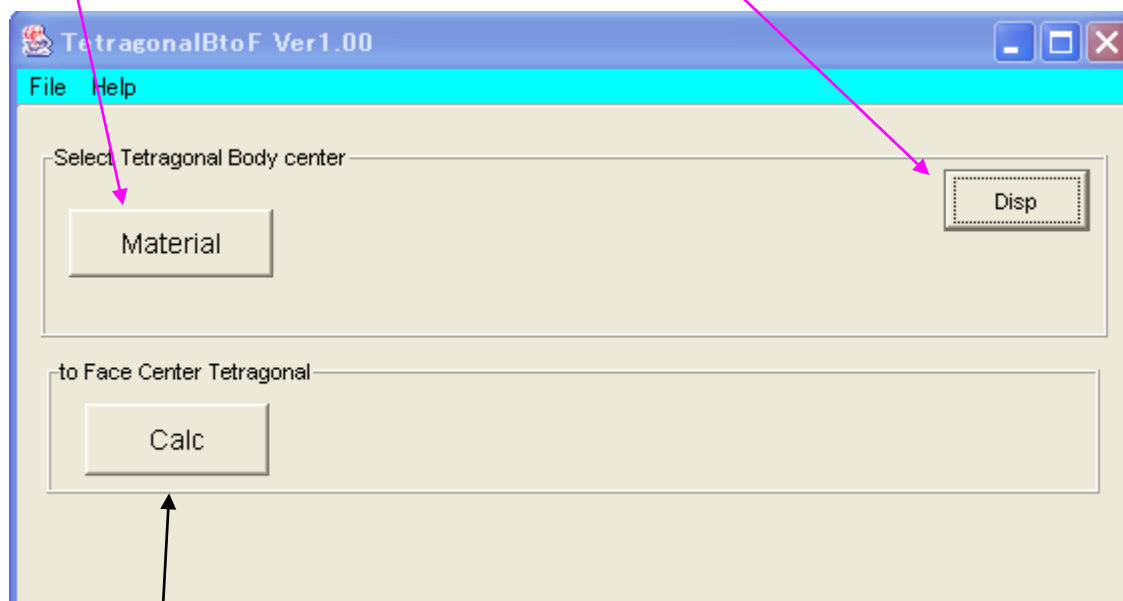
ODFPoleFigure2 → TexTools → DataBaseTools → TetragonalBtoA から起動



ソフトウェア

データベースに登録されている正方晶データを選択

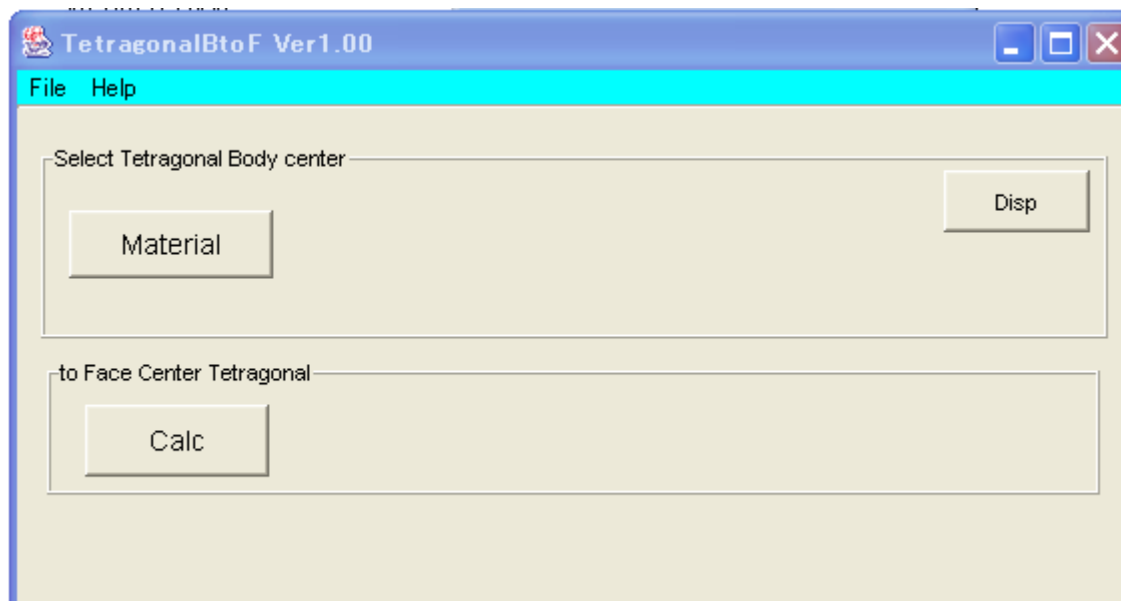
選択されたデータの表示



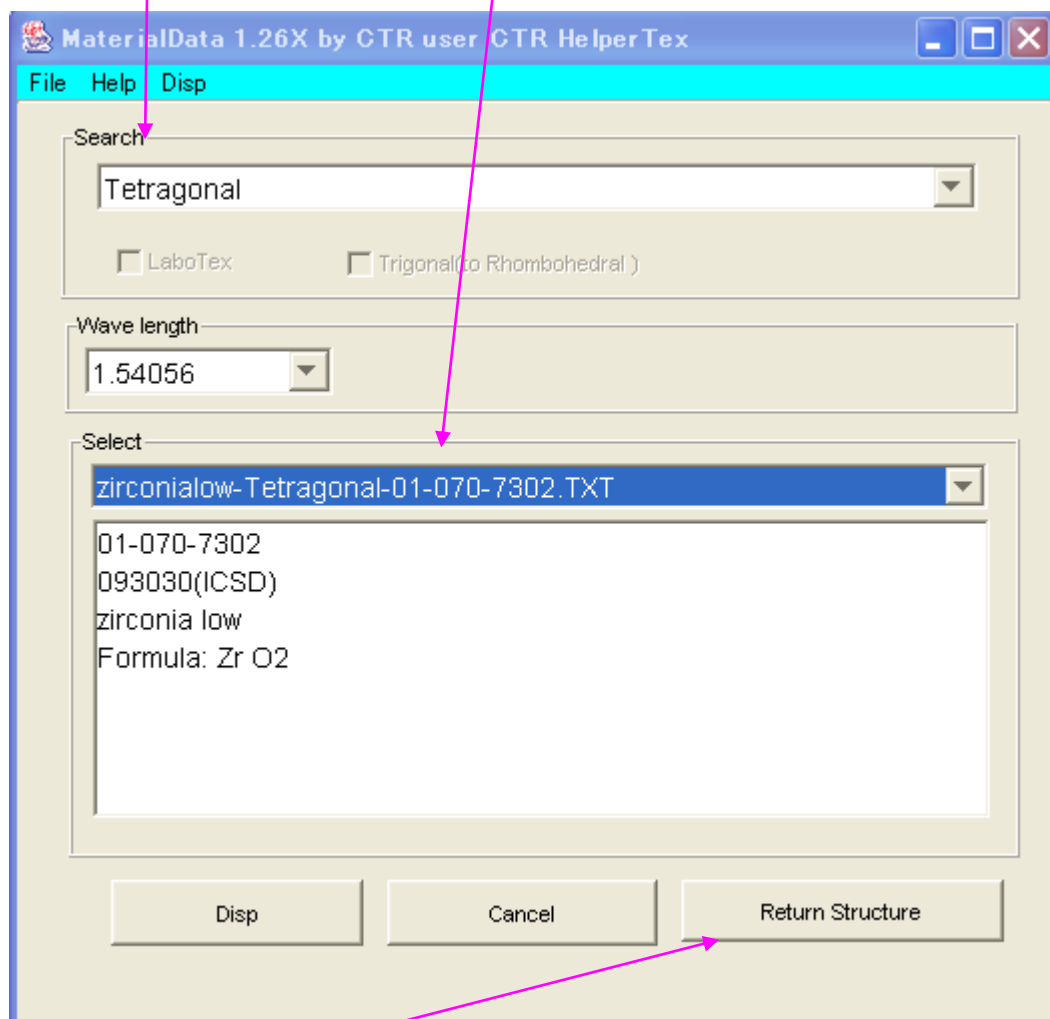
体心→面心の計算を行い、データを表示する。

操作

正方晶データの選択

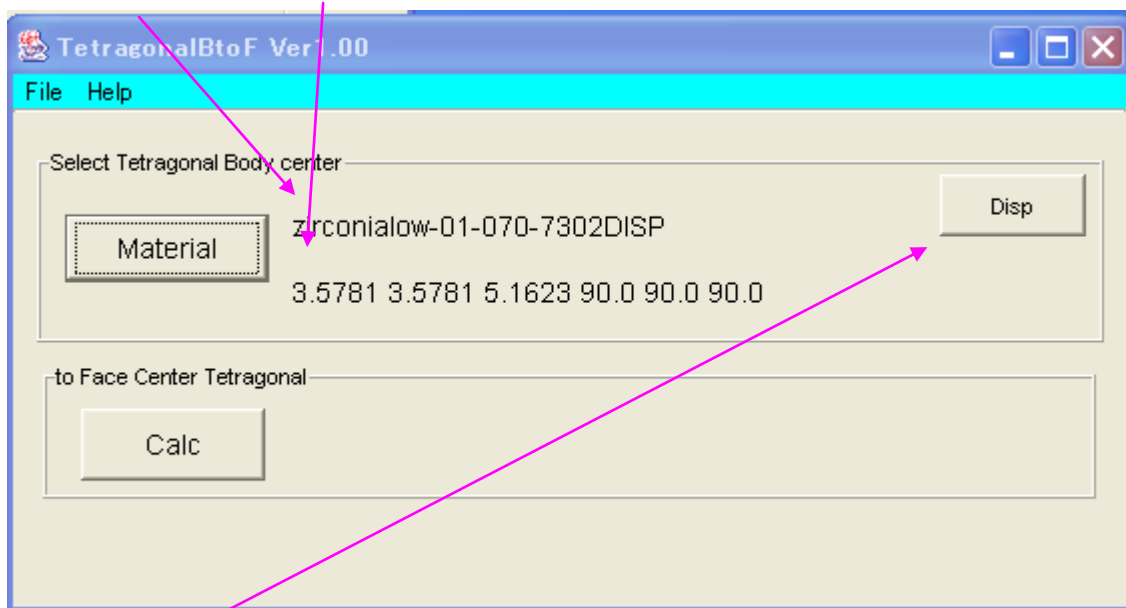


T e t r a g o n a l - > データを選択

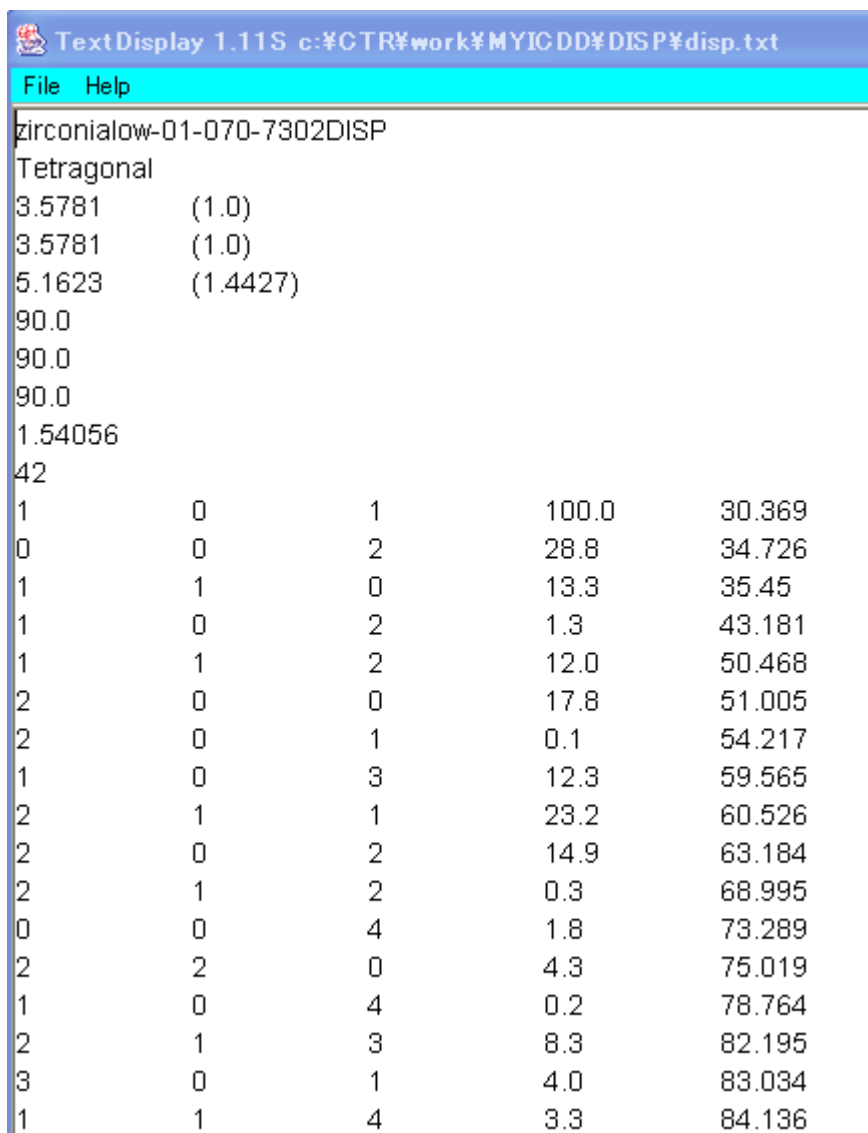


R e t u r n S t r u c t u r e でデータを持ちかえる。

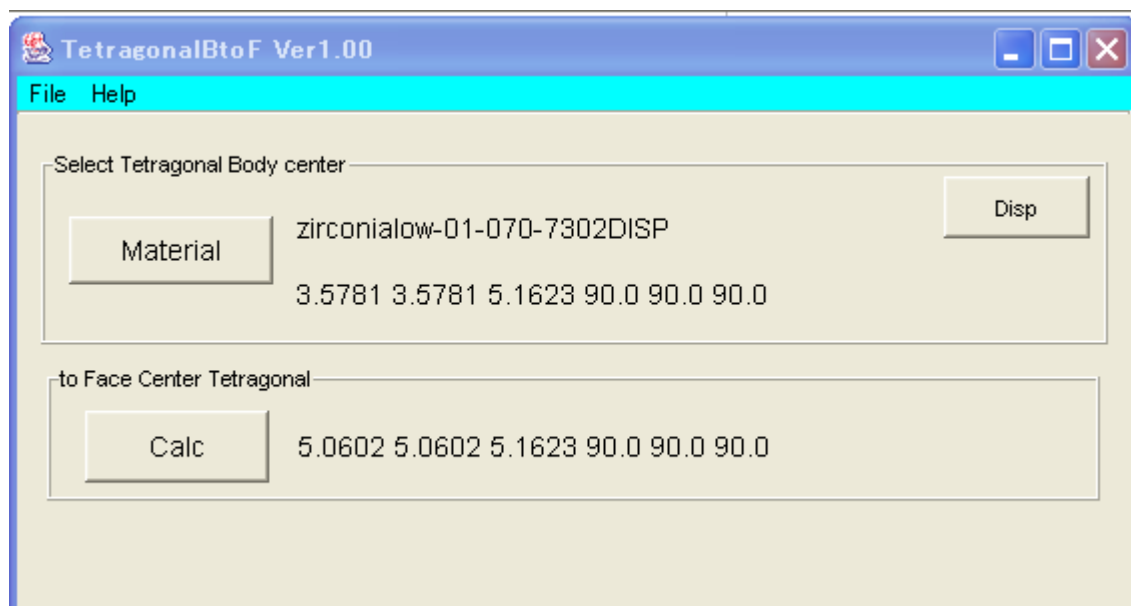
データ名と格子定数が表示される。



D i s p でデータの内容が表示される。



C a l c で面心正方晶データの格子定数と変更内容が表示、



正常に計算された、格子定数と変換データ

