

E B S Dデータ a n g、c t f、t x tデータの相互変換を行う

E B S D t o O D F ソフトウェア

Ver1.05

2023年04月08日

HelperTex Office

1. 概要
2. ソフトウェアの起動
3. ソフトウェアの使い方
4. 操作例 (a n g データ)
5. 操作例 (c t f データ)
6. 操作例 (t x t データ)
7. 操作例 (格子定数やS y m m e t r y 情報がないt x t データ)
8. M a k e M y I C D D (V e r 1. 2 7 以降) で新たにD a t a B a s e を作成
9. M a t e r i a l D a t a M a n u a l で既存D a t a B a s e の編集を行う
10. M a t e r i a l データ指定でT i t a n i u m の変換を行う。

1. 概要

E B S Dで測定されたデータは、各メーカ固有のフォーマットでファイル作成が行われています。
O I M (a n g)、H K L (c t f)、B r u k e r (t x t)などが知られています。

又、格子定数やS y m m t r yが指定されていないt x tデータも存在します。

これらのフォーマットを読み込める市販のソフトウェアは、T e x T o o l sとM T E Xですが、
L a b o T e xでは、S O Rフォーマットを読み込めます。

M T E Xでは、ソフトウェアのアップデートが繰り返され、以前読み込めたフォーマットでも
警告が発生する事もあります。

M T E Xでは情報をc i fで指定できるが、入力情報に誤りがある場合、c i f指定前に
ストップしてしまう。

M T E Xでは、現在a n gデータは警告が発生するが、a n g → c t fに変換しc t f読み込みでは
警告は発生しません。

このような状況のため、M T E Xに付属するE B S Dデータの相互変換を行い、M T E Xのアップデート
に耐えられるようなフォーマットの相互変換ソフトウェアを作成しました。

Format	MTEX	TexTools	LaboTex
OIM(ang)	○	○	X
HKL(ctf)	○	○	X
Bruker(txt)	△	X	X
Free(txt)	△	X	X
LaboTex(SOR)	X	X	○

△は、入力l i n eのメンバーを個々に指定変更して読み込みを実現する。

すべてのE B S D F o r m a tデータをA n g、c t f、S O Rに変換することで、
M T E X、T e x T o o l s、L a b o T e xでE B S DデータからO D F解析が可能になります。

M T E X付属データ (f e r r i t e . a n g) のO D F解析最大方位密度比較

	TexTools	MTEX	LaboTex
変更なしang	118.85	112.53	
HKL情報なしang	112.53	118.12	
HKL情報なし+IQ=1	112.53	118.12	
HKL情報なし+CI=1	87.73	118.12	
HKL情報なしang → ctf		118.12	
ang → SOR			187.49

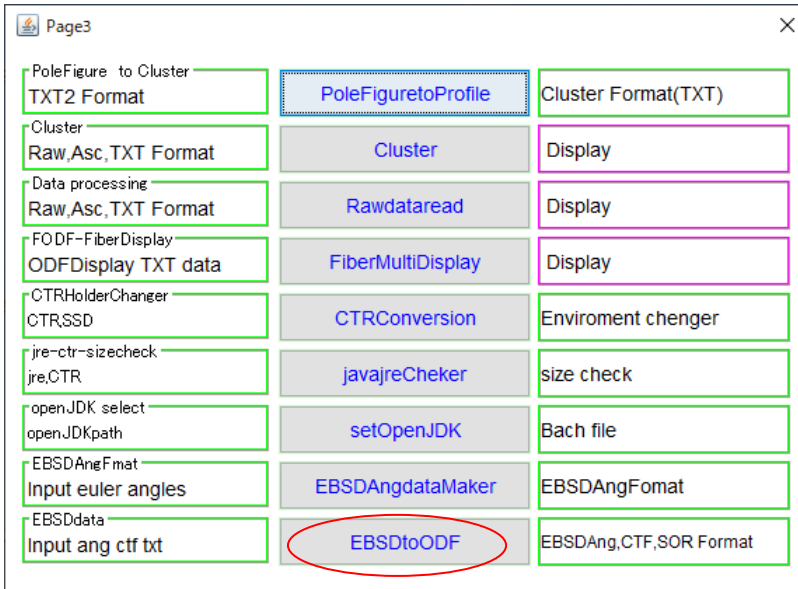
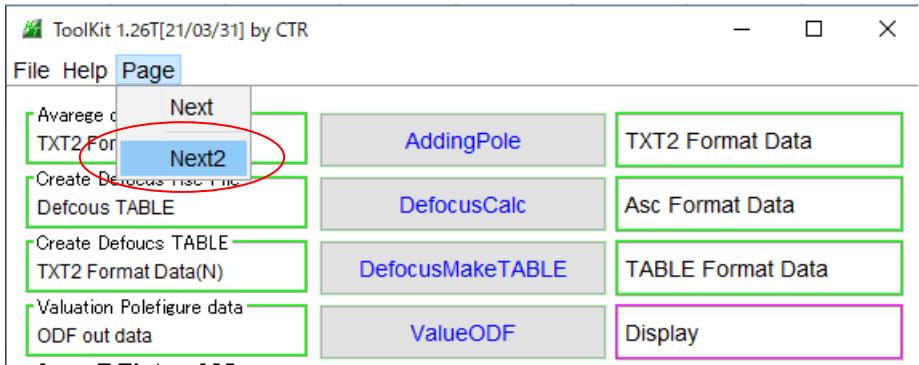
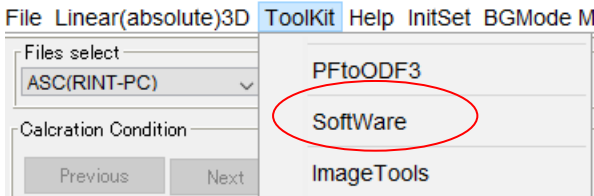
T e x T o o l sのc t fファイルは読み込める仕様であったが実際はO D F解析出来ていない

2. ソフトウェアの起動

C:\¥CTR¥bin¥EBSDtoODF.jar をマウスクリック

ODFPoleFigure2(1.5)TOOKIT->SoftWare->Page->Nest2

ODFPoleFigure2 3.96T[21/03/31] by CTR



3. ソフトウェアの使い方

OIM(ang),Oxford(ctf),Bruker(txt)ファイルを指定（緑色の枠内の変更はありません）

EBSDtoODF 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile .txt .ang .ctf file

MaterialData

Material cif .TXT .cif file

Group P1 Symmetry(OIM) 1 OxforCode 1 LaboTexCode 1 - C1 (triclinic)

Aaxis 1 Baxis 1 Caxis 1 alpha 90 beta 90 gamma 90

Makefile

DataStartline 0 PhasePotision 0 Selectphase 0 f1 1 F 2 f2 3 X 4 Y 5

OIM-Ang Holder

Filemake

緑色内は、ファイルは格子定数、Symmetry 情報が含まれていない EBSD データ時指定する。

Makefile

DataStartline 0 PhasePotision 0 Selectphase 0 f1

OIM-Ang

OIM-Ang

Oxford-ctf

LaboTex-SOR

Holder

Filemake

変換フォーマットを指定、作成するホルダ指定でファイルを作成します。

TexTools や LaboTex の場合、複数相から 1 相選択を行う。

4. 操作例 (a n g データ)

Chalcopyrite を選択、全相の場合、AllPhase を選択

EBSDtoODF 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\olivineopticalmap.ang

MaterialData

Material cif .TXT .cif file

Group P1 Symmetry(OIM) 42 OxforCode 5 LaboTex

Aaxis 5.24 Baxis 5.24 Caxis 10.3 alpha 90.0 beta 90.0 gamma 90.0

168: # XSTEP: 4.000000
169: # YSTEP: 4.000000
170: # NCOLS_ODD: 223
171: # NCOLS_EVEN: 223
172: # NROWS: 223
173: #
174: # OPERATOR: sem
175: #
176: # SAMPLEID:
177: #
178: # SCAND:
179: #
180: 1.65401 2.64662 1.40526 0.00000 0.00000 167804.0 0.450 1 0 1.094 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
181: 1.64181 2.64548 1.39307 4.00000 0.00000 178456.3 0.491 1 0 0.862 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
182: 1.65506 2.64548 1.40768 8.00000 0.00000 183684.2 0.615 1 0 0.812 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
183: 1.64198 2.64795 1.39764 12.00000 0.00000 184750.5 0.263 1 0 1.169 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
184: 1.64511 2.64658 1.40167 16.00000 0.00000 190592.6 0.425 1 0 0.975 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
185: 1.65003 2.65055 1.40223 20.00000 0.00000 175735.8 0.281 1 0 1.139 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
186: 1.64906 2.64736 1.40763 24.00000 0.00000 164054.9 0.282 1 0 1.315 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000

Makefile

DataStartline 180 PhasePotision 8 Selectphase 1 f1 1 F 2 f2 3 X 4 Y 5

LaboTex-SOR Holder C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\olivineopticalmapEtoO.SOR

Filemake

c t f ファイル変換後

Makefile

DataStartline 180 PhasePotision 8 Selectphase 1 f1 1 F 2 f2 3 X 4 Y 5

Oxford-ctf Holder C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\olivineopticalmapEtoO.ctf

Filemake C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\olivineopticalmapEtoO.ctf make complete !!

S O R データ変換後

Makefile

DataStartline 180 PhasePotision 8 Selectphase 1 f1 1 F 2 f2 3 X 4 Y 5

LaboTex-SOR Holder C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\olivineopticalmapEtoO.SOR

Filemake C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\olivineopticalmapEtoO.SOR make complete !!

5. 操作例（c t f データ）

Forsterite を選択、全相の場合、AllPhase を選択

EBSDtoODF 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\Forsterite.ctf

MaterialData

Material cif .TXT .cif file

Group P1 Symmetry(OIM) 22 OxforCode 3 LaboTex

Aaxis 4.756 Baxis 10.207 Caxis 5.98 alpha 90.0 beta 90.0 gamma 90.0

10: AcqE2 0
11: AcqE3 0
12: Euler angles refer to Sample Coordinate system (CS0)
13: Phases 4
14: 4.756;10.207;5.98 90;90;90 Forsterite 3 0 3803863129_5.0.6.3 1060505527 [Forsteri.cry]
15: 18.2406;8.8302;5.1852 90;90;90 Enstatite 3 0 3803863129_5.0.6.3 941869705 [Enstatit.cry]
16: 9.746;8.99;5.251 90;105.63;90 Diopside 2 0 3803863129_5.0.6.3 -1871822193 [Diopside.cry]
17: 5.431;5.431;5.431 90;90;90 Silicon 11 227 3803863129_5.0.6.3 -1022683988 J. Appl. Phys. [JAPIAU], v
18: Phase X Y Bands Error Euler1 Euler2 Euler3 MAD BC BS
19: 1 0.0000 0.0000 7 0 84.675 137.65 113.67 0.1000 138 255
20: 1 50.000 0.0000 7 0 84.415 137.65 113.36 0.1000 134 255
21: 1 100.00 0.0000 7 0 84.638 137.55 113.66 0.1000 137 245
22: 1 150.00 0.0000 7 0 84.437 137.80 113.35 0.3000 140 255
23: 1 200.00 0.0000 7 0 84.591 137.72 113.54 0.2000 136 255
24: 1 250.00 0.0000 7 0 84.436 137.68 113.37 0.3000 134 255
25: 1 300.00 0.0000 7 0 84.516 137.71 113.45 0.1000 140 255
26: 1 350.00 0.0000 7 0 84.445 137.83 113.41 0.3000 132 255
27: 1 400.00 0.0000 7 0 84.478 137.81 113.38 0.2000 136 255

Makefile

DataStartline 19 PhasePotision 1 Selectphase 1 f1 6 F 7 f2 8 X 2 Y 3

OIM-Ang Holder C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\ForsteriteEtoO.ang

Filemake

a n g データ変換後

Makefile

DataStartline 19 PhasePotision 1 Selectphase 1 f1 6 F 7 f2 8 X 2 Y 3

OIM-Ang Holder C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\ForsteriteEtoO.ang

Filemake C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\ForsteriteEtoO.ang make complete !!

S O R データ変換後

Makefile

DataStartline 19 PhasePotision 1 Selectphase 1 f1 6 F 7 f2 8 X 2 Y 3

LaboTex-SOR Holder C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\ForsteriteEtoO.SOR

Filemake C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\ForsteriteEtoO.SOR make complete !!

6. 操作例（t x t データ）

EBSDtoODF 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile C:\CTR\tmp\Bruker.txt Aluminum

MaterialData

Material cif .TXT .cif file

Group Fm3c Symmetry(OIM) 43 OxforCode 11 LaboTexCode 7 - O (cubic)

Aaxis 4.041 Baxis 4.041 Caxis 4.041 alpha 90.0 beta 90.0 gamma 90.0

#	Index	Phase	x(Px)	y(Px)	x(μm)	y(μm)	phi1	PHI	phi2	Bands	BC	GrainIndex
33:	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100	-1
34:	1	1	1	0	-1.467608805E-1	0	0	3.027579964E2	3.653832585E1	9.45015566		
35:	2	1	2	0	-2.93521761E-1	0	0	3.020324937E2	3.672107379E1	9.45240552		
36:	3	1	3	0	-4.402826415E-1	0	0	3.021778401E2	3.642235228E1	9.45188848		
37:	4	0	4	0	-5.87043522E-1	0	0	0	0	98		
38:	5	0	5	0	-7.338044025E-1	0	0	0	0	95		
39:	6	0	6	0	-8.80565283E-1	0	0	0	0	81		
40:	7	3	7	0	-1.027326164	0	0	2.104537271E2	2.049464255E1	1.07364257		
41:	8	3	8	0	-1.174087044	0	0	1.61643648E2	4.206260957E1	1.59604370		
42:	9	1	9	0	-1.320847925	0	0	6.1886381534.377322893E1	3.416663739E2			
43:	10	0	10	0	-1.467608805	0	0	0	0	101		

Makefile

DataStartline 39 PhasePotision 2 Selectphase 1 f1 7 F 8 f2 9 X 3 Y 4

OIM-Ang Holder C:\CTR\tmp\BrukerEtoO.ang

Filemake

a n g データ変換後

Makefile

DataStartline 39 PhasePotision 2 Selectphase 1 f1 7 F 8 f2 9 X 3 Y 4

OIM-Ang Holder C:\CTR\tmp\BrukerEtoO.ang

Filemake C:\CTR\tmp\BrukerEtoO.ang make complete !!

c t f ファイル変換後

Makefile

DataStartline 39 PhasePotision 2 Selectphase 1 f1 7 F 8 f2 9 X 3 Y 4

Oxford-ctf Holder C:\CTR\tmp\BrukerEtoO.ctf

Filemake C:\CTR\tmp\BrukerEtoO.ctf make complete !!

S O R データ変換後

Makefile

DataStartline 39 PhasePotision 2 Selectphase 1 f1 7 F 8 f2 9 X 3 Y 4

LaboTex-SOR Holder C:\CTR\tmp\BrukerEtoO.SOR

Filemake C:\CTR\tmp\BrukerEtoO.SOR make complete !!

7. 操作例（格子定数やS y m m e t r y 情報がない t x t データ）

EBSDtoODF 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile C:\mtext-5.4.0\data\EBSD\titanium.txt

MaterialData

Material cif .TXT .cif file

Group P1 Symmetry(OIM) 1 OxfordCode 1 LaboTexCode 1 - C1 (triclinic)

Aaxis 1 Baxis 1 Caxis 1 alpha 90 beta 90 gamma 90

1:	phi1	Phi	phi2	phase	ci	iq sem_signal	x	y	grainId
2:	227	3.99925	343.998	0	0.391	3169.6	1	0	1
3:	298.932	155.674	301.718	0	0.7	3173.6	17605	12	0
4:	298.03	155.571	301.047	0	0.614	3147.5	17328	24	0
5:	298.509	155.642	301.608	0	0.823	3305.9	17295	36	0
6:	298.956	155.845	302.095	0	0.527	2912.5	19095	48	0
7:	298.354	155.753	301.087	0	0.632	2976.8	17766	60	0
8:	298.702	155.547	301.802	0	0.791	3143.4	18189	72	0
9:	298.793	155.811	301.425	0	0.882	3411.8	18203	84	0
10:	298.433	155.486	301.614	0	0.505	3304.9	16712	96	0
11:	281.615	147.97	306.664	0	0.705	2687.6	18552	108	0
12:	101.667	31.8822	113.202	0	0.664	2883.7	17457	120	0
13:	281.73	147.869	306.537	0	0.427	3026.4	17895	132	0
14:	109.473	36.6802	64.2372	0	0.455	2525.4	17837	144	0
15:	109.77	36.9535	63.7118	0	0.609	3107.1	18330	156	0
16:	110.016	36.8779	63.5227	0	0.773	3227.6	18165	168	0
17:	109.318	36.7976	64.3191	0	0.314	3272	19169	180	0
18:	109.564	36.7816	304.079	0	0.709	2832.2	17923	192	0
19:	289.466	143.117	295.946	0	0.218	3067.9	18963	204	0

Makefile

DataStartline 2 PhasePotision 4 Selectphase 0 f1 1 F 2 f2 3 X 4 Y 5

OIM-Ang Holder C:\mtext-5.4.0\data\EBSD\titaniumEtoO.ang

Filemake

格子定数やS y m m e t r y 情報を

c i f 指定

EBSDtoODF 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile C:\mtext-5.4.0\data\EBSD\titanium.txt

MaterialData

Material cif .TXT .cif file

Group P1 Symmetry(OIM) 1 OxfordCode 1 LaboTexCode 1 - C1 (triclinic)

Aaxis 1 Baxis 1 Caxis 1 alpha 90 beta 90 gamma 90

183:	phi1	Phi	phi2	phase	ci	iq sem_signal	x	y	grainId
184:	289.328	143.331	235.52	0	0.391	3169.6	1	0	1
185:	109.704	36.8521	304.08	0	0.7	3173.6	17605	12	0
186:	109.41	36.5249	64.3615	0	0.614	3147.5	17328	24	0
187:	109.635	36.7369	64.075	0	0.823	3305.9	17295	36	0
188:	109.707	36.5708	63.755	0	0.527	2912.5	19095	48	0
189:	109.507	36.6567	64.087	0	0.632	2976.8	17766	60	0
190:	289.5	143.154	356.019	0	0.791	3143.4	18189	72	0
191:	109.815	36.5066	64.070	0	0.882	3411.8	18203	84	0
192:	289.298	143.465	295.04	0	0.505	3304.9	16712	96	0
193:	109.323	36.5209	64.682	0	0.705	2687.6	18552	108	0
194:	110.343	36.506	303.658	0	0.664	2883.7	17457	120	0
195:	109.967	36.8526	303.88	0	0.427	3026.4	17895	132	0
196:	109.382	36.3811	304.48	0	0.455	2525.4	17837	144	0
197:	289.485	143.494	295.25	0	0.609	3107.1	18330	156	0
198:	141.522	119.335	238.83	0	0.773	3227.6	18165	168	0
199:	321.116	60.5513	181.46	0	0.314	3272	19169	180	0
200:	321.193	60.2104	181.40	0	0.709	2832.2	17923	192	0

MaterialData

Material cif .TXT .cif file

Group P1 Symmetry(OIM) 1 OxfordCode 1 LaboTexCode 1 - C1 (triclinic)

Aaxis 1 Baxis 1 Caxis 1 alpha 90 beta 90 gamma 90

Makefile

DataStartline 2 PhasePotision 4 Selectphase 0 f1 1 F 2 f2 3 X 4 Y 5

OIM-Ang Holder C:\mtext-5.4.0\data\EBSD\titaniumEtoO.ang

Filemake

開く

ファイルの場所(D): cif

最近使った項...

デスクトップ

ドキュメント

PC

ネットワーク

5000035.cif

5000036.cif

Ag-Silver.cif

Al2O3-Corundum.cif

Al-Aluminum.cif

C-Diamond.cif

Cr-Chromium.cif

crystal.phl

Cu-Copper.cif

Fe-Iron-alpha.cif

Fe-Iron-Austenite.cif

Fe-Iron-beta.cif

Fe-Iron-delta.cif

Fe-Iron-gamma.cif

GaAs.cif

Hematite.cif

LaB6.cif

Magnetite.cif

Mg-Magnesium.cif

Mn-Manganese-gamma.cif

Mo-Molybdenum-bcc.cif

Mo-Molybdenum-fcc.cif

NaCl-Halite.cif

Ni-Nickel-cubic.cif

Ni-Nickel-hexagonal.cif

olivine.cif

quartz.cif

Rhabdite.cif

Si-Silicon.cif

Ti-Titanium-alpha.cif

Ti-Titanium-beta.cif

ZrO2-Baddeleyite.cif

ファイル名(N): Ti-Titanium-alpha.cif

ファイルのタイプ(T): 全てのファイル

開く

取消

c i f から情報を取り入れ

EBSDtoODF 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\titanium.txt Titanium

MaterialData

Material cif C:\mtex-5.4.0\data\cif\Ti-Titanium-alpha.cif

Group P63/mmc Symmetry(OIM) 62 OxforCode 9 LaboTexCode 11 - D6 (hexagonal)

Aaxis 2.95 Baxis 2.95 Caxis 4.686 alpha 90.0 beta 90.0 gamma 120.0

a n g データ変換

Makefile

DataStartline 2 PhasePotision 4 Selectphase 0 f1 1 F 2 f2 3 X 4 Y 5

OIM-Ang Holder C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\titaniumEtoO.ang

Filemake C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\titaniumEtoO.ang make complete !!

c t f データ変換

Makefile

DataStartline 2 PhasePotision 4 Selectphase 0 f1 1 F 2 f2 3 X 4 Y 5

Oxford-ctf Holder C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\titaniumEtoO.ctf

Filemake C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\titaniumEtoO.ctf make complete !!

S O R データ変換

Makefile

DataStartline 2 PhasePotision 4 Selectphase 0 f1 1 F 2 f2 3 X 4 Y 5

LaboTex-SOR Holder C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\titaniumEtoO.SOR

Filemake C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\titaniumEtoO.SOR make complete !!

Material

から情報を取り入れる場合D a t a B a s e に S y m m e t r y の編集が必要になります。

編集する方法

M a k e M y I C D D (V e r 1 . 2 7 以降) で新たにD a t a B a s e を作成

M a t e r i a l D a t a M a n u a l で既存D a t a B a s e の編集を行う

8. MakeMyICDD (Ver 1. 27以降) で新たにDatabaseを作成

MakeMyICDD-add-d-value 1.27T[21/03/31] by CTR

File Help Display

Inputfile(*.txt)

C:\CTR\ICDD\00-004-0831-Zinc.txt

disp

Outputfile(*.txt)

home: C:\CTR\work\MyICDD

filename Zinc_syn-G194

disp

Filemake

TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\MYICDD\Zinc_syn-G194.TXT

File Help

Zinc_syn-G194

4

2.665

2.665

4.947

90.0

90.0

120.0

1.54050

20

0	0	2	53.0	2.473	36.29
1	0	0	40.0	2.308	38.99
1	0	1	100.0	2.091	43.23
1	0	2	28.0	1.687	54.33
1	0	3	25.0	1.342	70.05
1	1	0	21.0	1.332	70.66
0	0	4	2.0	1.237	77.02
1	1	2	23.0	1.173	82.10
1	0	5	6.0	0.909	115.79
1	1	4	11.0	0.906	116.38
2	1	0	5.0	0.872	124.04
2	1	1	9.0	0.859	127.48
2	0	4	2.0	0.844	131.83
0	0	6	1.0	0.825	138.20
2	1	2	9.0	0.822	138.94

00-004-0831Zinc_synFormula: Zn

_symmetry_space_group_name_H-M	'P63/mmc'
_symmetry_Int_Tables_number	194
_Symmetry	62

情報が登録されます。

9. MaterialDataManualで既存DataBaseの編集を行う

既存 Database を選択

MaterialDataManual Free 1.01 by CTR

File Help

Create Material data

Material name(File name) Titanium.TXT

Crystal Hexagonal New

Lattice constat

a axis 2.9505 b axis 2.9505 c axis 4.6826

α 90.0 β 90.0 γ 120.0

Input miller index(3 Axis) & I / Io

Example

Between the data (tab)

1	1	1	100.0
1	0	2	13.0
1	1	0	11.0
1	0	3	11.0
2	0	0	1.0
1	1	2	9.0
2	0	1	6.0

Wave length 1.54056

☐ LaboTex(a<=b<=c a<=90 β <90 γ <=90)

☐ to FaceCenter Tetragonal

Chemical Formula: Ti

cif

_symmetry_space_group_name_H-M

_symmetry_Int_Tables_number 0

symmetry 0

Set

Disp Cancel Return structure Modification

TextDisplay 1.145 C:\CTR\work\WV\ICDD\DISP\disp.txt

File Help

TitaniumDISP

Hexagonal

2.9505 (1.0)

2.9505 (1.0)

4.6826 (1.5871)

90.0

90.0

120.0

1.54056

9

1	0	0	25.0	2.5552	35.09
0	0	2	30.0	2.3413	38.416
1	0	1	100.0	2.243	40.17
1	0	2	13.0	1.7262	53.003
1	1	0	11.0	1.4753	62.951
1	0	3	11.0	1.332	70.66
2	0	0	1.0	1.2776	74.157
1	1	2	9.0	1.2481	76.215
2	0	1	6.0	1.2326	77.357

Titanium Formula: Ti

cif

から情報を取り込む

開く

ファイルの場所(D): cif

最近使った項...

デスクトップ

ドキュメント

PC

ネットワーク

5000035.cif

5000036.cif

Ag-Silver.cif

Al2O3-Corundum.cif

Al-Aluminum.cif

C-Diamond.cif

Cr-Chromium.cif

crystal.phl

Cu-Copper.cif

Fe-Iron-alpha.cif

Fe-Iron-Austenite.cif

Fe-Iron-beta.cif

Fe-Iron-delta.cif

Fe-Iron-gamma.cif

GaAs.cif

Hematite.cif

LaB6.cif

Magnetite.cif

Mg-Magnesium.cif

Mn-Manganese-gamma.cif

Mo-Molybdenum-bcc.cif

Mo-Molybdenum-fcc.cif

NaCl-Halite.cif

Ni-Nickel-cubic.cif

Ni-Nickel-hexagonal.cif

olivine.cif

quartz.cif

Rhaddite.cif

Si-Silicon.cif

Ti-Titanium-alpha.cif

Ti-Titanium-beta.cif

ZrO2-Baddeleyite.cif

ファイル名(N): Ti-Titanium-alpha.cif

ファイルのタイプ(T): すべてのファイル

cif

_symmetry_space_group_name_H-M	P63/mmc	
_symmetry_Int_Tables_number	194	
symmetry	62	Set

Disp Cancel Return structure Modification

情報が取り込まれています。

Set

Modification

Set後、Modificationでデータが変更されます。

Disp Cancel Return structure Modification

Titanium.TXT was rewritten.

変更後、Dispで確認できます。

TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\MYICDD\DISP\disp.txt

File Help

TitaniumDISP

Hexagonal

2.9505	(1.0)				
2.9505	(1.0)				
4.6826	(1.5871)				
90.0					
90.0					
120.0					
1.54056					
9					
1	0	0	25.0	2.5552	35.09
0	0	2	30.0	2.3413	38.416
1	0	1	100.0	2.243	40.17
1	0	2	13.0	1.7262	53.003
1	1	0	11.0	1.4753	62.951
1	0	3	11.0	1.332	70.66
2	0	0	1.0	1.2776	74.157
1	1	2	9.0	1.2481	76.215
2	0	1	6.0	1.2326	77.357

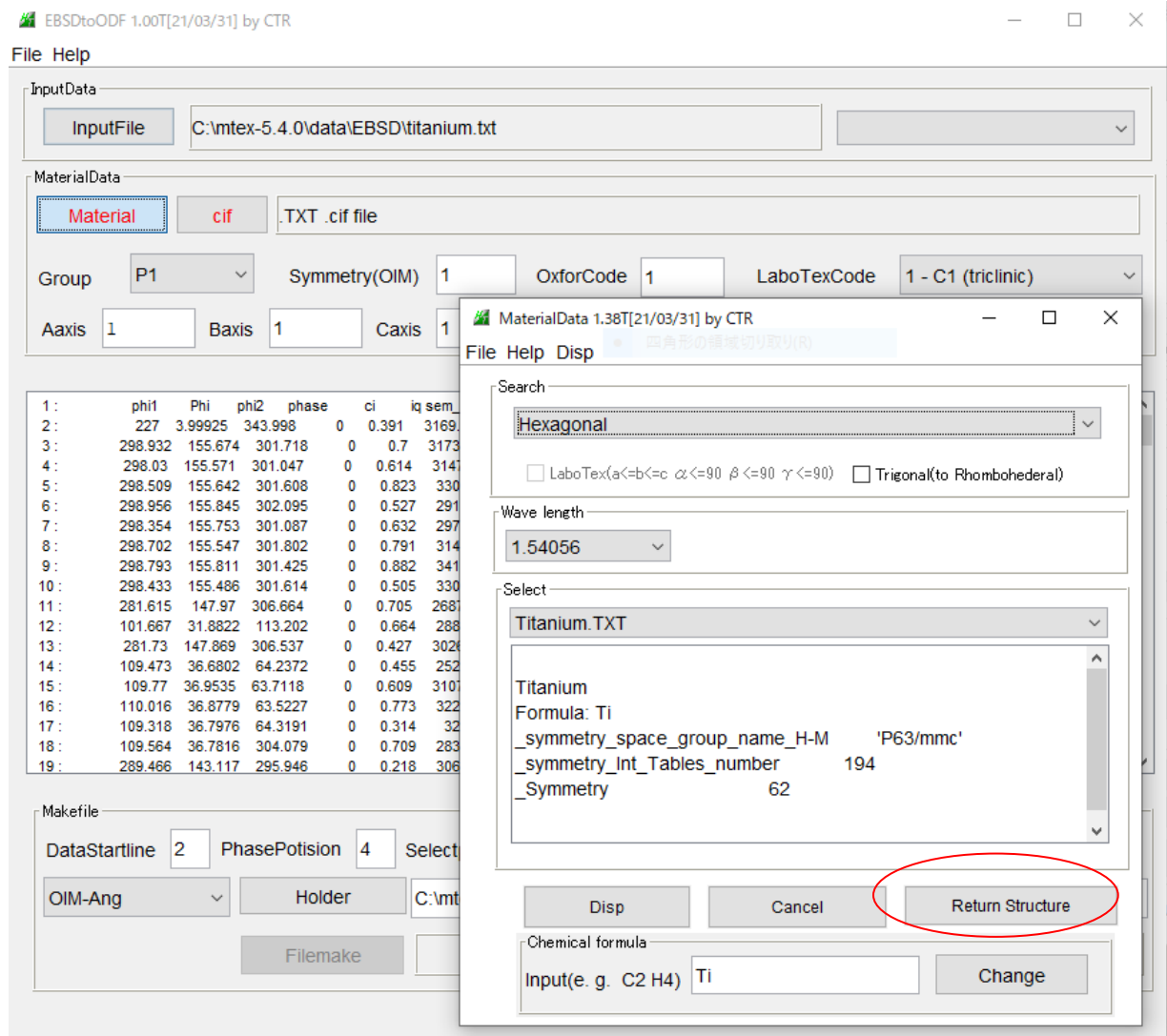
Titanium Formula: Ti

_symmetry_space_group_name_H-M 'P63/mmc'

_symmetry_Int_Tables_number 194

_Symmetry 62

10. Materialデータ指定でTitaniumの変換を行う。



Return Structure で情報が取り込まれます。

