

結晶方位 (h k l) [u v w]とEuler角度

Calc HKLUVW

Ver. 1.11M

2016年08月31日



HelperTex Office

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

概要

試料座標系と結晶座標系の位置関係をEuler角 ($\phi 1$ 、 Φ 、 $\phi 2$) で表現される。

結晶方位は、(h k l) [u v w] で表現され、立法晶の場合、以下の関係を持つ

$$h = n \cdot \sin \Phi \cdot \sin \phi 2$$

$$k = n \cdot \sin \Phi \cdot \cos \phi 2$$

$$l = n \cdot \cos \Phi$$

$$u = m(\cos \phi 1 \cdot \cos \phi 2 - \sin \phi 1 \cdot \sin \phi 2 \cdot \cos \Phi)$$

$$v = m(-\cos \phi 1 \cdot \sin \phi 2 - \sin \phi 1 \cdot \cos \phi 2 \cdot \cos \Phi)$$

$$w = m \cdot \sin \phi 1 \cdot \sin \Phi$$

$$\sin \phi 1 = w / (\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}) / \sqrt{h^2 + k^2}$$

$$\cos \Phi = l / (\sqrt{h^2 + k^2 + l^2})$$

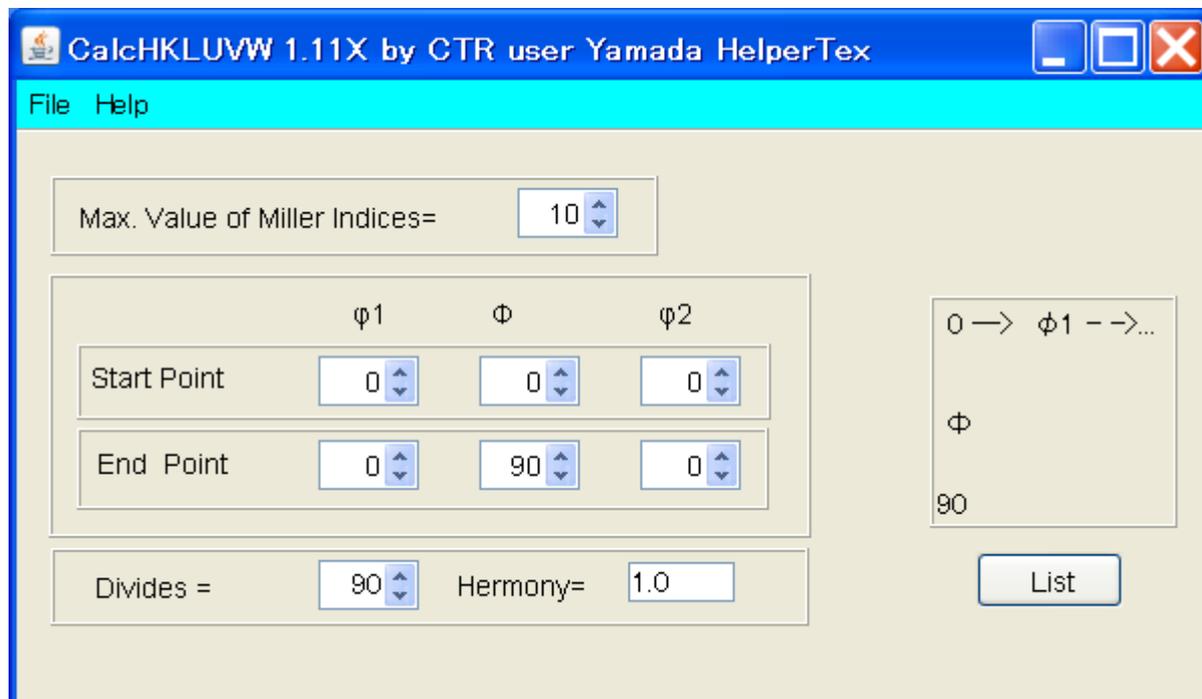
$$\cos \phi 2 = k / (\sqrt{h^2 + k^2}) = h / (\sqrt{h^2 + k^2})$$

ただし $h=k=0$ の場合 $\cos(\phi 1 + \phi 2) = u / (\sqrt{u^2 + v^2 + w^2})$

本ソフトでは結晶方位分布関数 (Crystallite Orientation Distribution Function, ODF) の ($\phi 1, \Phi, \phi 2$) から別の ($\phi 1, \Phi, \phi 2$) までを一定間隔で結晶方位を求めるソフトウェアです。

ソフトウェア名称

CalcHKLUVW.jar



Max. Value of Miller Indices:

計算する最大 miller 指数

Divices:

Euler 角度を発生される数

Hermony:

固定した Euler 角度の許容範囲

h=k=0 の扱い

固定した Euler 角度を優先し、残りを他に配分する。

たとえば $\phi 2=0$ の場合、計算された $\phi 1+\phi 2=45.0$ の場合、 $\phi 1=45$ とする

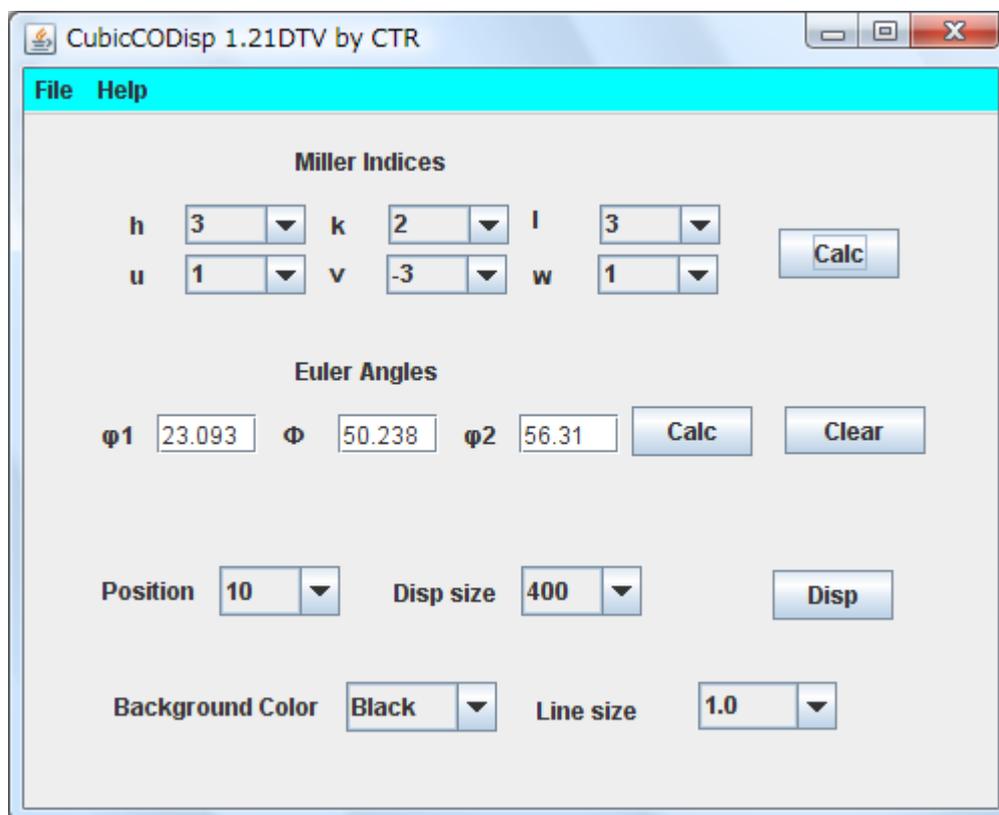
使い方

たとえば、 $\phi 2$ 断面に表示されている (3 2 3) の結晶方位(hkl)[uvw]を求める

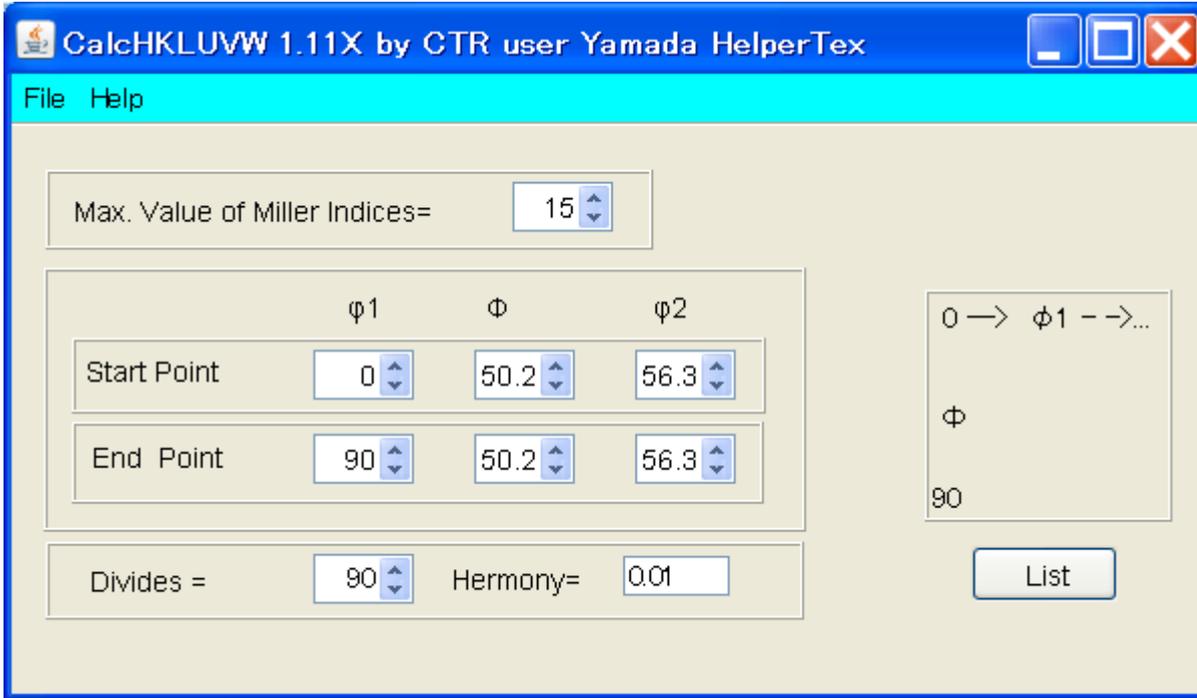
(3 2 3) は $\phi 2 = 56.31$ 。3は既知であるから $\phi 1$ を求める

Cubic CODisp を使い Φ を決定する。

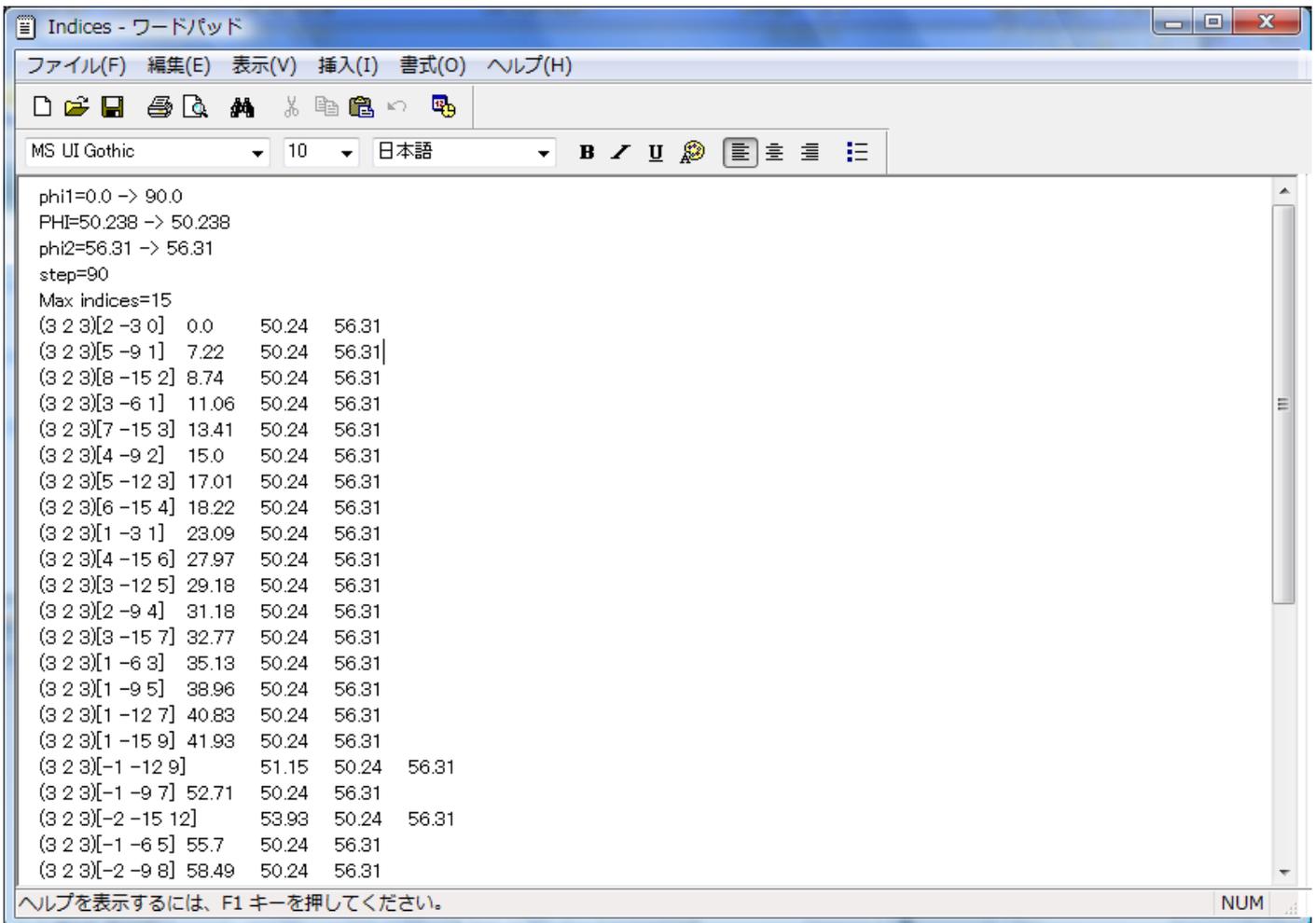
(323)[1-31]を入力して $\Phi = 50.233$ であることが判明



よって、 $\phi 2 = 56.31$ 、 $\Phi = 50.233$ 、(3 2 3)として $\phi 1 = 0$ 度から 90 度を計算する。



l i s tにて以下が表示される。



$\phi 2$ 断面 55 度には、 $\phi 2 = 56.3$ 度に

(323)[2-32],(323)[1-31],(323)[032],(323)[1-33]が記入されているが、その方位以外も計算される。