ラウエカメラと極点測定から方位解析

CrystalOrientationDソフトウエア Ver.2.16



2025年03月05日 *HelpeTex Office* 目次

- 1. 概要
- 2. 起動
- 3. ソフトウエア使い方
- 4. 極点図選択
 - 4. 1極点図表示
 - 4. 2 描画画面サイズ変更(複数の極点図描画ではサイズを小さくする)
 - 4.3 (9,2,20) 極点図
 - 4. 4標準ステレオ投影図(011)
 - 4.5結晶方位を求める。
- 5. ラウエカメラ測定結果の入力
 - 5. 1データ入力
 - 5. 2ラウエカメラデータから [9, 2, 20] 方位計算
 - 5. 3結晶方位解析
- 6. 解析結果と**ODF**図
- 7. ODF、TriclinicとOrthorhombic
- 8. ND rotateの使い方
- 9. 指数表示時、等高線をドットに変更し高速化

1. 概要

本ソフトウエアは単結晶の方位解析である。

手入力、ラウエカメラ解析結果、極点図解析結果から、結晶取り付け方位を計算し、

(h k 1) [u v w] を算出、指定極点図の描画を行う。

例えば、

S c h j m i d 因子最大値[9, 2, 20] 方位への切り出し角度の計算 リガク「X線回折ハンドブック」掲載の標準ステレオ投影図 に利用可能

2. 起動

ODFPoeFigure-Tookit-OrientationDisplayTools

General Orientation Display {hkl} <uvw></uvw>	OrientationDisplay	Orientation Disp
-Cubic Orientation Display {hkl} <uvw></uvw>	NewCubicCODisp	Orientation Disp
Hexagonal Orientation Display {hkl} <uvw></uvw>	HexaConvert	Orientation Disp
-Cubic,Tetragonal,Orthorombic hklKuvw>	CrystalOrientationDisp	Orientation Disp
-Cubic hklKuvw>	CrystalRotation	Orientation Disp
FCCSlipFactor {hkl}Muvw>	FCCSchmidFactorCalc	SchmidFactor Disp
BCCSchmidFactor [hk1Kuvw>	BCCSchmidFactorCalc	SchmidFactor Disp
HexatoCubic h k i l	HexatoCubic	Schmidcalc Display
hkl	CubictoHexa	HexaIndex Display
HCPSchmidFactor {hkilKuvtw>	HCPSchmidFactorCalc	ScfmidFactor Disp
CrystalOrientation jLabel21	CrystalOrientationD	Direction PoleFigure
-TXT2 PoleFigureRotation	PFRotation	PoleFugreDisp

本バージョンより、同一カテゴリーから複数のソフトウエア軌道を可能にしている。

3. ソフトウエア使い方

					/	_
CrystalOrier	ntationD 2.16 by CTR	PDuser CTR CTR				— 🗆
Help Blir	nd-10 CreatePF	Step:1.0 hkldisp=	true α0->90 X-Axis:S	South	/	
leFigure — Select file ¶	↓		•	/		
011 ~	Center of gravit	PoleFigure(TX	T2) RD input mode is a	South. Maxindex	20 Extent Angle	3.0
Data input a	aera					
Alp <mark>ha(cente</mark> r	r=0) Xaxis(S	South: Beta=0)(RD: Be	eta=180) hkl		- Calculate Indi	
	0	0	110	to Stack		001 ~
Reset	90	180	0 0 1	Stack		Clear
Caluclation -						Set
ND rotate	0.0 degree	calc U-matrix 🛛 🔾	notContour Calo	PoleFigure FWHM 10 de	egree -1 1 0	Append
_ hklKuvw>-					0 1 -1	All
calc{hl	kl} <uvw></uvw>	dex 15 exte	ntAngle 2.0			
				NewCubicCO Disp	• ther(h,k	(j) [1,1,1
RD) 方向変更					医上回轮点
RD)方向変更		結	晶取付方位計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結	晶取付方位計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結; (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結。 (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結; (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結。 (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結; (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結; (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結。 (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結; (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結。 (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結。 (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更		結。 (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD) 方向変更		結; (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定
RD)方向変更) older 	ystalOrientationD	結。 (h	晶取付方位計算 kl)[uvw]計算	表示	極点図指定 File

手入力、ラウエカメラ解析結果の入力、極点測定解析結果(TXT2)ファイルの選択から 取付方位を計算する。この取り付け方位から指定する極点図描画や結晶方位の計算が行われる。 4. 極点図選択



ピーク間隔

指数付け最大紙数 誤差角度



4. 1極点図表示

取付方位の決定後、極点図を指定し指数付き極点図を描画する。



4. 2 描画画面サイズ変更(複数の極点図描画ではサイズを小さくする)



4.3 (9,2,20) 極点図

Calculate Index CalcPoleFigure -20 -2 -9 -20 -9 -2 -2 -9 -20 -2 -20 -9 -9 -20 -2 -9 -20 -2 -9 -2 -20	O11 ~ Clear Set Append All
🗹 Other(h,k,l)	9,2,20

Otherにチェックを入れ、Setする。

02029

描画で ND に近い指数の(α、β)を求め、[2029] 方位の軸立てを行う



切り出し(α 、 β)が決定される

4. 4標準ステレオ投影図(011)

内臓されている全ての指数を指定しAllで描画する。更に追加(Append)も可能

Superior CrystalOrientationD 2.13 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Help Blind-40 CreatePFStep:1.0 hkldisp=true a0->90 X-Axis:South





極点図の中心に [401] ->ND 方向の可能性が高い、RD 方向に表示なし、指定した指数以外?



4.5結晶方位を求める。

極点図選択で、指数付けから結晶取り付け方位が計算されているので、

結晶方位(h k l) [u v w]の決定を行う。

複数の(hkl)[uvw]から選択し、Triclinicにおける複数の方位が計算される。 Triclinicにおいては、すべて同一である。

しかし、TriclinicからOrthorhombicに変換した場合、同一ではなくなる。 単結晶のODF解析では、Triclinic解析で行う。

Select file —								
011 🗸	Center of gravity	PoleFigure(TXT2)	RD input mode	e is South.	Maxindex	20	ExtentAngle	3.0
C:¥CTR¥DATA¥ - Data input aer:	fSingle−Si−400¥220_ch	B00D3S_2.TXT						
Alpha(center=0) Xaxis(Sout	h: Beta=0)(RD: Beta=1	80) b kl			гСа	lculate Index —	
	45 011	-64 989	110		to Stack	0	alcPoleFigure	011 ~
_	45.000	100.000				- -	71-1	Clear
Reset	45.038	139.993	1-10		Stack		1 - <i>1</i> 1 7 -1	Clear
Cluciation		1					7 -1 -1	Set
calc U-mat	trix CalcPoleFi	gure FWHM	0.1 Max	5.0 Mini	0.1	-	1 -1 -7	Append
[hklKuvw>							1 -7 -1	All
calc{hkl}	<uvv> maxIndex</uvv>	15 extentAn	gle 20					
	41 (000 04 75 0			New			Other(h,k,l)	1,1,1
4 0 1)[1 -3	3 -4] (306.04 75.9	5 90.0)		INCONC				
12	170	05	4	2	4			
9.5 1.52	-178	65 13	1	-3	-4			
0.54	-179	98	2	-7	-9			
3 42	178	37	3	-9	-11			
9.4 <u>2</u> 9.4	178	24	3	-10	-12			
0.16	170.	62	2	10	12			
0.10	-179	.03	3	-10	-13			
0.89	1/9.		3	-11	-14			
1.5	-1/8	48	3	-11	-15			
3.54	-178	.16	4	-11	-15			
3.65	179.4	46	4	-12	-15			
kl} <uvw>(exter</uvw>	ntAngle=2.0)							
4 0 1)[1 -3 -4] (306.04 75.96 90.0)				1			
0 1)[3 -10 -12]	(308.95 75.96 90.0)			NewCu	bicCODis	oに方位	立を継続し	
0 1)[1 -4 -5] (3	308.11 78.69 90.0)							
0 1)[3 -11 -15]	(305.72 78.69 90.0)			各種解析	近が可能			
0 2)[2 -7 -9] (3	307.21 77.47 90.0)				1.0			
3 0 3)[3 -10 -13	3] (306.85 77.01 90.0))						
4 0 3)[3 -11 -14	4] (307.53 77.91 90.0))						
0 1)[1 -3 -4]	(306.04 75.964 90	0) TD: [3 17	-121					
4 0)[-4 1 -2]	(216.04 00.0 14.02	6) TD:[-10.0	171					
4 / 1 / 2 / 41	(210.04 30.0 14.03) TD-[*12.3) TD-147.4	2.21					
14/-3-41	(120.04 14.030 0.0 (200.04 75.064 0.0) ID.[1/-1	401					
4 410 4 41	(300.04 / 5.964 0.0) ID:[-1/3	-12]					
4 1)[3 1 -4]	(126.04 14.036 90.	0) ID:[-12 -	173]					
4 1)[3 1 -4] 0 4)[-4 3 1]	(36.04 90.0 75.964) TD: [3 -12	-17]					
4 1)[3 1 -4] 0 4)[-4 3 1] 1 0)[1 -4 3]						7		1.0
4 1)[3 1 -4] 0 4)[-4 3 1] 1 0)[1 -4 3]							Initialize	File

同一極点図が描画される

5. ラウエカメラ測定結果の入力

ラウエカメラ解析時のX方向により、South、Eastを切り替える。

East入力の場合、計算時にSouth変換が行われる。

背面反射ラウエ法による結晶方位決定



5. 1データ入力 6 { 1 0 i } 0.313197-0.651626 0.690862 46.3 -64.3 7 {-1 1 0} 0.108853 0.984029 0.140841 81.9 .83.7



他の指数入力計算でも、同一極点図が表示される。 取付方位が決定されれば、極点測定データと同様に、[9, 2, 20]方位や結晶方位解析が可能

5. 2ラウエカメラデータから [9, 2, 20] 方位計算



指数は異なるが、(α 、 β)角度は同一です。

5. 3結晶方位解析

CrystalOrientatio	onD 2.13 by CTR PDuse	r HelperTex CTR	a0->90 X-Avis:Sc	auth			- 0
PoleFigure		.o milasp-irac	40-250 7-7413.00				
Select file							
011 ~	Center of gravity	PoleFigure(TXT2)	RD input mode is	South.	Maxindex	20 Extent Angle 3	3.0
Data input aer	'a						
Alpha(center=1	0) Xaxis(South	: Beta=0)(RD: Beta=	^{:180)} hkl			Calculate Index	
	46.3	-64.3	101		to Stack	CalcPoleFigure	011 ~
Reset	81.9	83.7	-110		Stack	101	Clear
Cluclation							Set
calc U-ma	trix CalcPoleFie	ure FWHM	0.5 _{Max}	100 Min	i 0.1	0 1 1	Append
-thk IK uvw>						-1 1 0	
colofbkl	ana may Inday	15 extentA	ingle 20			01-1	All
(0 1 4)[-3 -	-4 1] (126.04 14.04	0.0)	×	N	ewCubicCO Disp	Other(h,k,l)	,1,1
	1 (,					
chiangle 88.61	phian -178 (gle 31	calcuvw -3	-4	1		
90.8	179.6	3	-4	-5	1		
89.83	-179.4	46	-7	-9	2		
91.57	178.8	9	-9	-11	2		
88.07 89.46	1/8./	ŏ 11	-10	-12	3		
89.40 89.48	-179.	4	-10	-13	3		
90.18	-179.7	79	-11	-14	3		
(0 2 9)[-7 -9 2] ((0 2 11)[-9 -11 2 (0 3 13)[-10 -13 (0 3 13)[-11 -13 (0 3 14)[-11 -14 (0 1 4)[-3 -4 1] (4 0 1)[1 -3 -4] (1 4 0)[-4 1 -3] (1 0 4)[-4 3 1] (4 1 0)[1 -4 3] (0 4 1)[3 1 -4]	127.21 12.53 0.0)] (128.83 10.3 0.0) 3] (126.85 12.99 0.0) 3] (129.51 12.99 0.0) 3] (127.53 12.09 0.0) (126.04 14.036 0.0) (306.04 75.964 90.0 (216.04 90.0 14.036 (126.04 14.036 90.0 (36.04 90.0 75.964) (306.04 75.964 0.0)	TD: [17 - TD: [3 1] TD: [-12 TD: [-12 TD: [3 -1 TD: [3 -1 TD: [-17	-12 3] 7 -12] 3 17] -17 3] 12 -17] 3 -12]				
						Initialize	File
ウエカメラ	解析結果						
4)[-3 -4 1]) 1)[1 -3 -4] 0)[-4 1 -3]) 4)[-4 3 1] 0)[1 -4 3] 1)[3 1 -4]	(126.04 14.036 (306.04 75.964 (216.04 90.0 1 (126.04 14.036 (36.04 90.0 75 (306.04 75.964	0.0) 90.0) 4.036) 90.0) 5.964) 0.0)	TD: [17 -12 3] TD: [3 17 -12] TD: [-12 3 17] TD: [-12 -17 3] TD: [3 -12 -17] TD: [-17 3 -12]				
「回解析結	果						
) 1)[1 -3 -4] 0)[-4 1 -3] 4)[-3 -4 1] 1)[3 1 -4]	(306.04 75.964 (216.04 90.0 1 (126.04 14.036 (306.04 75.964	90.0) 4.036) 0.0) 0.0)	TD: [3 17 -12] TD: [-12 3 17] TD: [17 -12 3] TD: [-17 3 -12]				
) 4)[-4 3 1] 0)[1 -4 3]	(126.04 14.036 (36.04 90.0 75	90.0) .964)	TD: [-12 -17 3] TD: [3 -12 -17]				



一致しています。

7. ODF, TriclinicとOrthorhombic

方位の対称性チェック (Disp: Orthorhombic、trueOBR: Triclinic)

MewCubicCODisp 1.24 by CTR PDuser HelperTex CTR —		×					
File Help Symmetry Special Index							
Miller Ind Disp							
(hkl)[uvv OBR	Calc	;					
FWHM C trueOBR Mini 0.1 001 ~ Other 1.2.3	Disp						
Euler Angle							
(p1 P p2) <=90 0.0 54.7356 45.0 Calc							
Present Condition							
Euler Angle							
Double Miller Indices							
		\leftarrow					
			(410)[1-43]	(36.04	90.0 75.964)	TD: [3 -1	12 -171
DISP		_	(0.4.1)[3.1.4]	(306.04	75 964 0 0)	TD: [-17	3 - 121
Position 10 V Disp size 400 V DISP			(104)[-431]	(126.04	14.036 00.0)	TD: [-12	_17 31
BG color Black V Line size 2.0 V Minus			(1 0 4)[-4 0 1]	(216.04	00.0 14.026)	TD: [-12	2 171
			(140)[-41-3]	(210.04	90.0 14.030)	TD: [-12	10.01
				(126.04	14.036 0.0)	TD. [17 -	-12 3]
			(4 0 1)[1 -3 -4]	(306.04	75.964 90.0)	TD: [3 1/	7 -12]
\backslash							
				-	0		
(0 4 1)[3 1 -4]			14 4 0 1 4 4 3				
(0 1 4)[-3 -4 1]	(<u>@</u>)		(140)[-41-3]	\cap			0
	<u> </u>		(<u>@</u>	\sim $+$			



1:	(4 1 0)[1 -4 3]	36.04	90.0 75.964
2:	(1 0 4)[-4 -3 1]	53.96	14.036 90.0
3:	(041)[3-14]	53.96	75.964 0.0
4:	(1 4 0)[4 -1 3]	36.04	90.0 14.036
5:	(4 0 1)[-1 -3 4]	53.96	75.964 90.0
6:	(014)[3-41]	53.96	14.036 0.0

(014)[3-41]



7.1 Triclinic

(4 1 0)[1 -4 3]	(36.04	90.0 75.964)	TD: [3 -12 -17]
(0 4 1)[3 1 -4]	(306.04	75.964 0.0)	TD: [-17 3 -12]
(1 0 4)[-4 3 1]	(126.04	14.036 90.0)	TD: [-12 -17 3]
(1 4 0)[-4 1 -3]	(216.04	90.0 14.036)	TD: [-12 3 17]
(0 1 4)[-3 -4 1]	(126.04	14.036 0.0)	TD: [17 -12 3]
(4 0 1)[1 -3 -4]	(306.04	75.964 90.0)	TD: [3 17 -12]



どの方位からでも [9220] 方位切り出し角度は同一結果になります。

7.2 Orthorhombic

1:	(4 1 0)[1 -4 3]	36.04	90.0	75.964
2:	(1 0 4)[-4 -3 1]	53.96	14.036	90.0
3:	(0 4 1)[3 -1 4]	53.96	75.964	0.0
4:	(1 4 0)[4 -1 3]	36.04	90.0	14.036
5:	(4 0 1)[-1 -3 4]	53.96	75.964	90.0
5:	(4 0 1)[-1 -3 4]	53.96	75.964	90.0
6:	(0 1 4)[3 -4 1]	53.96	14.036	0.0



右側が一致しないため、Orthorhombic解析では方位の切り出しには適さない。

本ソフトウエアでは、複数の極点図が表示されるため、ODFPoleFigureソフトウエアの TaskKillを使用してください。

M ODFPoleFigure2S 4.09 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Linear(absolute)Contour ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free O

- Files select		-
ASC(RINT-PC)	PFtoODF3	_
Holder	SoftWare	
Holder	ImageTools	
Rename	PopLATools	
Renamw-delete	ODFAfterTools	-
Calcration Condition		
Previous Next	FoleOnentation10013	
Backgroud delete mode	DataBaseTools	
🗹 🔿 Double Mo 🔿 Sing	FiberTools	• Nothing BG defocus DSH
\bigcirc Minimum($\alpha \beta$)	StandardODFTools	Trans blinds angle
Peak slit 7.0 mm BG Slit 7	DefocusTools	pe 80 deg. 90 deg
Ref Trans Schulz ref	ClusterTools	Absorption coefficien 133.0
Defocus file Select Trasmission de	InverseTools	
Defocus(1) functions fil	MeasureDatatoASCTools	inum-H-O¥Al_random¥defocus¥D
Make defocus function	OrientationDisplayTools	V Normalization degree
O Defocus(3) function file	TXT2Tools	artLab-DSH2mm-Schulz
	VectorTools	
Detocus(2) function file	EBSDTools	H1.2mm+Schulz+RSH5mm
Smoothing for ADC	TaskKill	ation CenterData

8. ND rotateの使い方

ラウエカメラなどで測定した結果では、基準方向が右手に表示される事があります。



East入力値をStackへ退避 (初期値をNDrotateに使用するため)

極点図では、X 方向は-TD方向になっている

🔏 C:\CTR\work\CrystalOrientationD\111 —		
File Help View		
RD {1,1,1} TD 01-1 •01-1 •011 •011	Max=2990.85 Min=0.0 2989.0 2988.0 2987.0 2986.0 2986.0 2984.0 2983.0 2982.0 2982.0 2982.0 2982.0 2982.0 2987.0 2979.0 2977.0 2976.0 2975.0 2973.0 2972.0	Valuetation ND rotate 0.0 degree calc U-matrix [hk]Kuvw> maxIndex 15 extent Angle (2 6 1)[11 -3 -4] (340.42 81.02 18.43)

X 方向を RD 方向に変更

退避(stack)した方位を復活しNDを-90度回転し方位計算

ScrystalOrientationD 2.14T[24/12/31] by CTR

File Help Blind-10 CreatePFStep:1.0 hkldisp=true α0->90 X-Axis:East





9. 指数表示時、等高線をドットに変更し高速化





