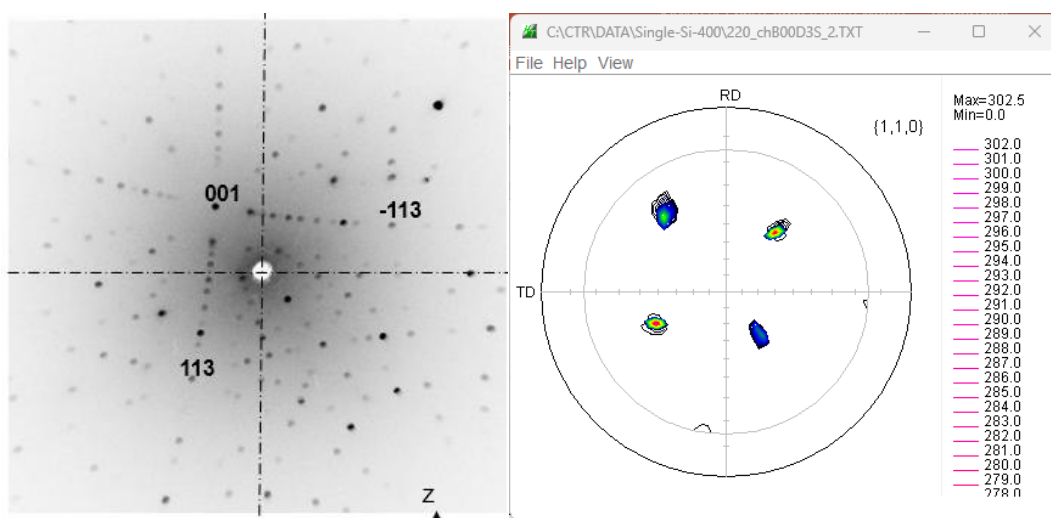


ラウエカメラと極点測定から方位解析

# C r y s t a l O r i e n t a t i o n D ソフトウェア

Ver.2.16



2025年03月05日

*HelpTex Office*

## 目次

1. 概要
2. 起動
3. ソフトウェア使い方
4. 極点図選択
  4. 1 極点図表示
  4. 2 描画面画面サイズ変更（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（0 1 1）
  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、T r i c l i n i c と O r t h o r h o m b i c
8. N D r o t a t e 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

本ソフトウェアは単結晶の方位解析である。

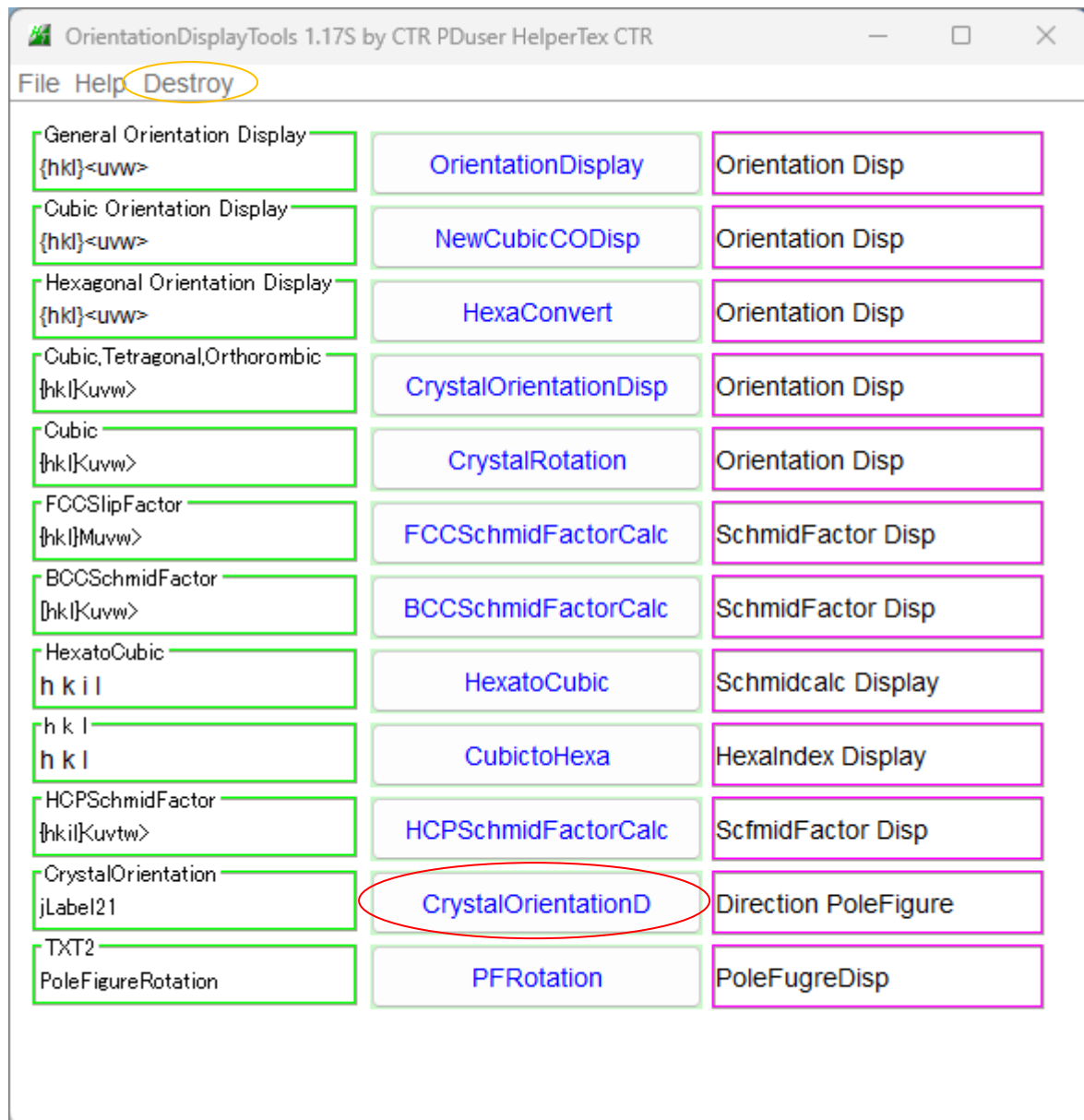
手入力、ラウエカメラ解析結果、極点図解析結果から、結晶取り付け方位を計算し、 $(h\ k\ l)$   $[u\ v\ w]$  を算出、指定極点図の描画を行う。

例えば、

Schmid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

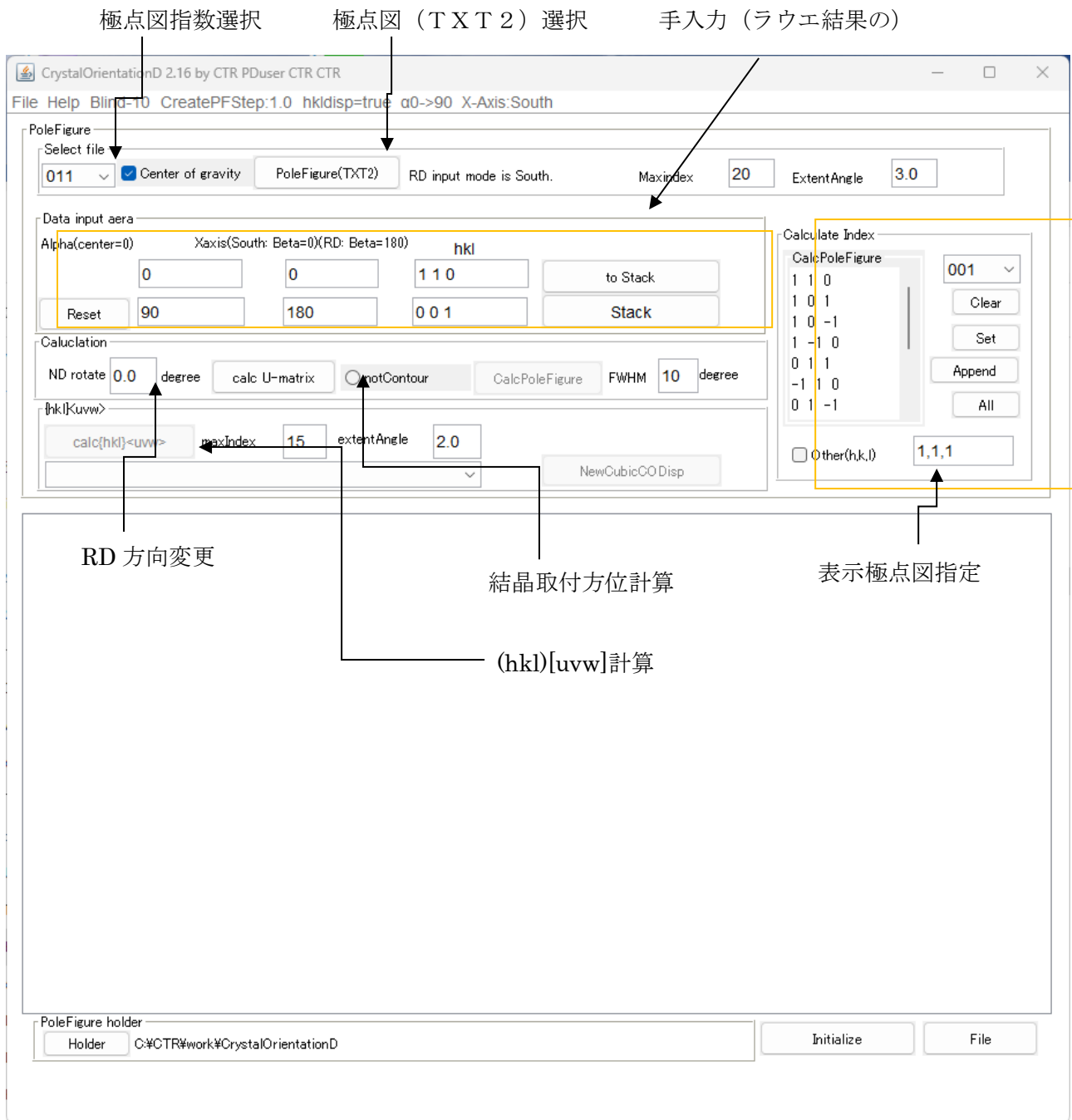
## 2. 起動

ODFPoeFigure-Toolkit—OrientationDisplayTools



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

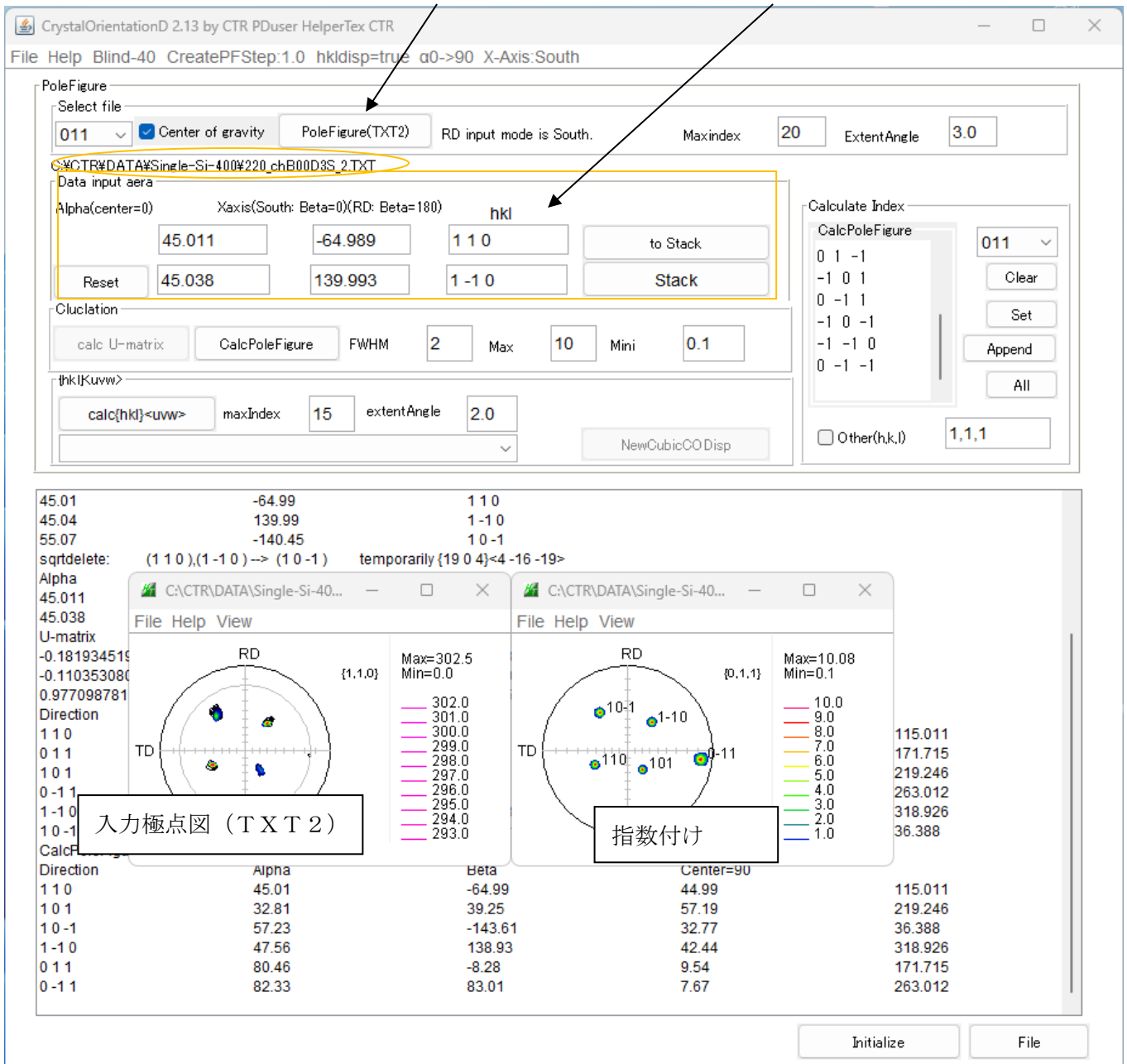
### 3. ソフトウェア使い方



手入力、ラウエカメラ解析結果の入力、極点測定解析結果 (T X T 2) 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

CTR付属極点データ (TXT 2) の選択 測定データの指数付け



極点図選択におけるパラメータは

ピーク間隔

指数付け最大紙数

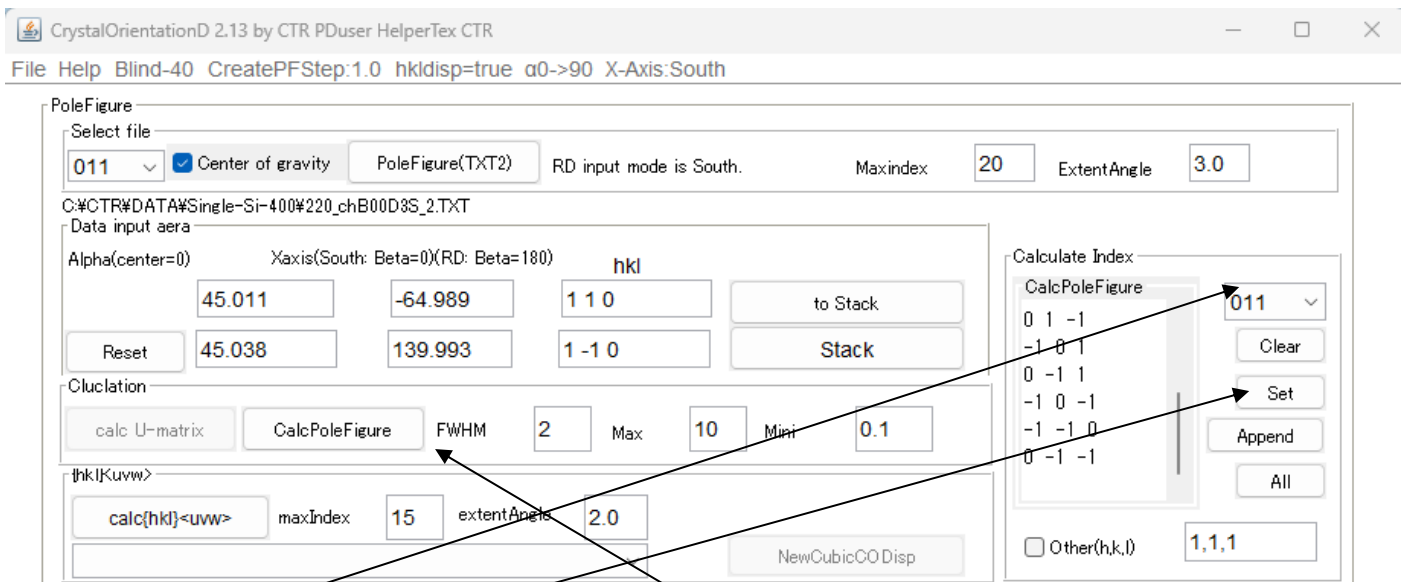
誤差角度

【文書の重要な部分を強調したり、このスペースを使って注目ポイントを強調したりしましょう。このテキストは、ドラッグしてページ上の好きな場所に配置できます。】

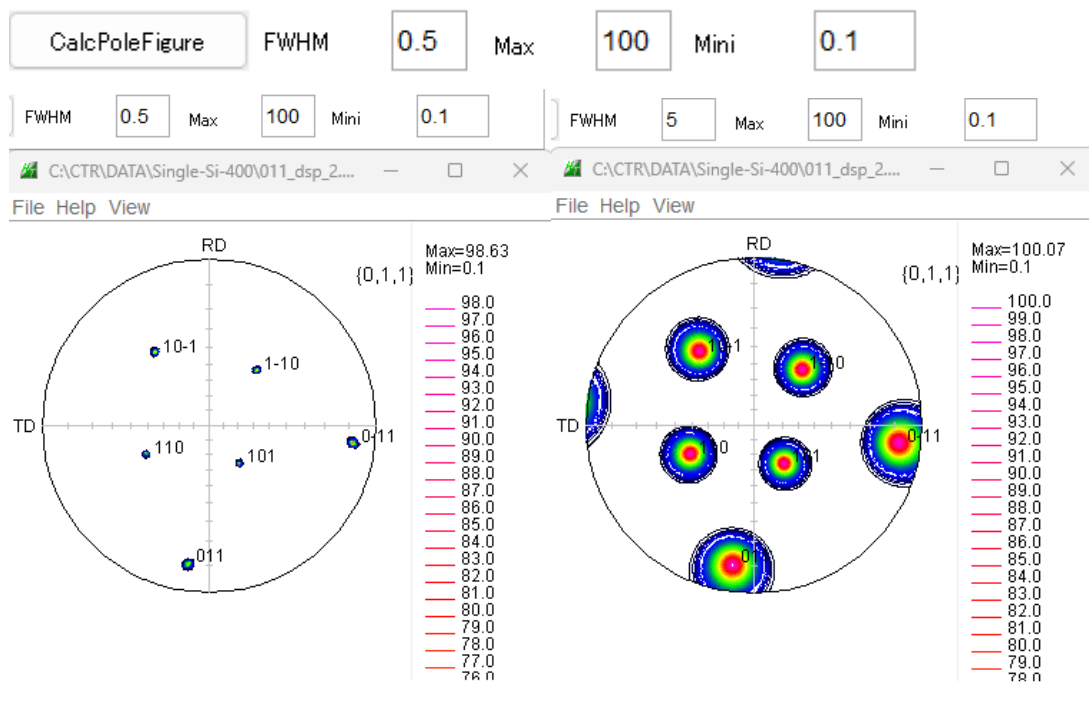
選択後、(h k l) [u v w] を計算し表示する

#### 4. 1 極点図表示

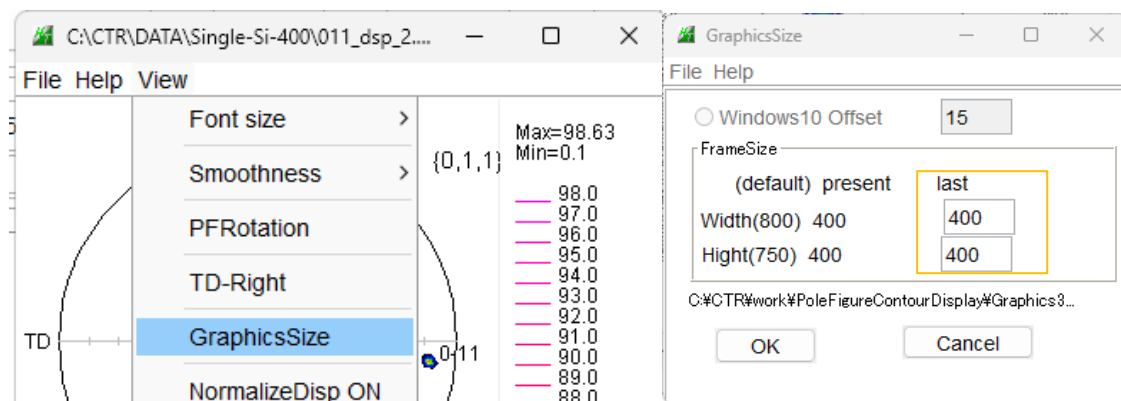
取付方位の決定後、極点図を指定し指数付き極点図を描画する。



極点図を選択 Setし、Calc Pole Figureにて描画する。



#### 4. 2 描画面面サイズ変更（複数の極点図描画ではサイズを小さくする）



4. 3 ( 9 , 2 , 2 0 ) 極点図

Calculate Index

CalcPoleFigure

-20 -2 -9

-20 -9 -2

-2 -9 -20

-2 -20 -9

-9 -20 -2

-9 -2 -20

011

Clear

Set

Append

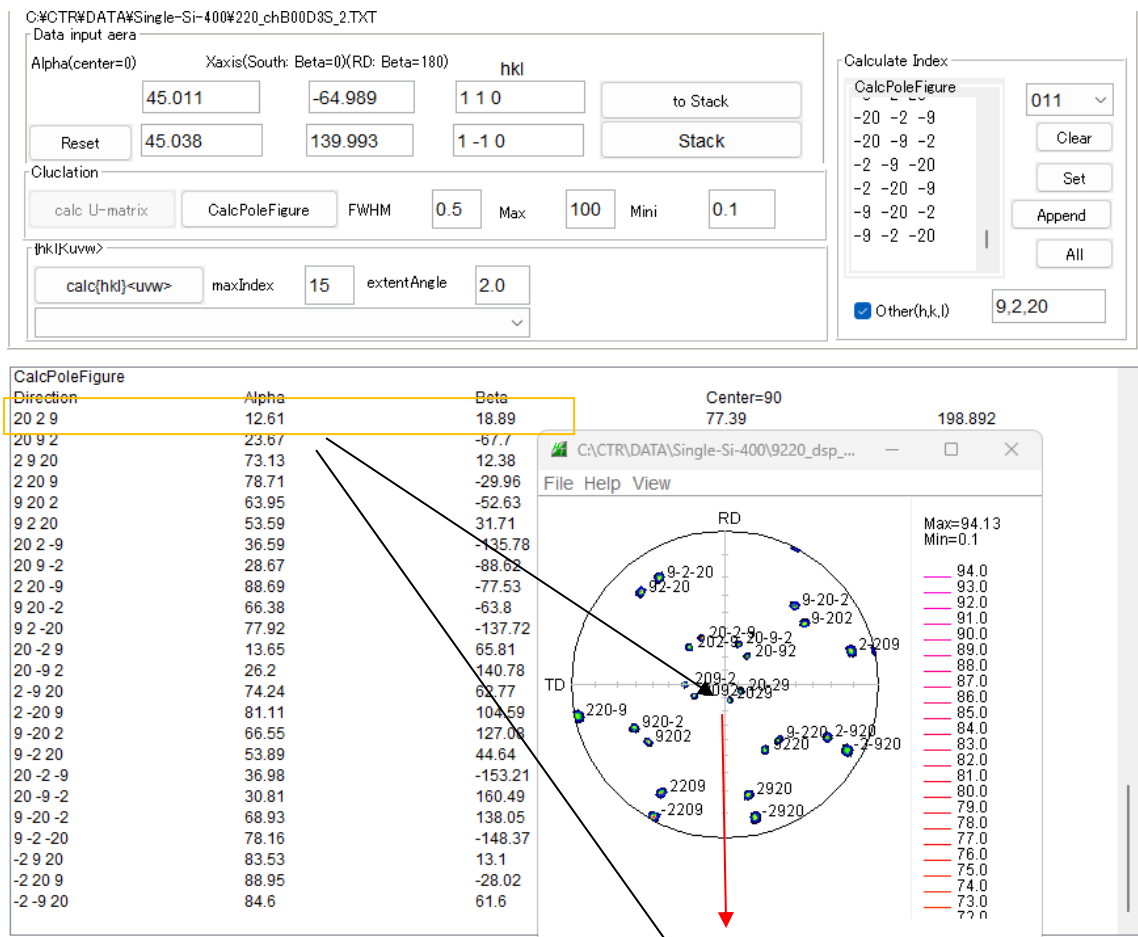
All

☒ Other(h,k,l)

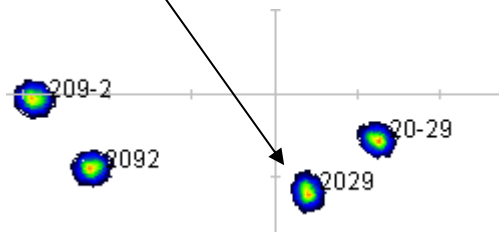
9,2,20

Otherにチェックを入れ、Setする。

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



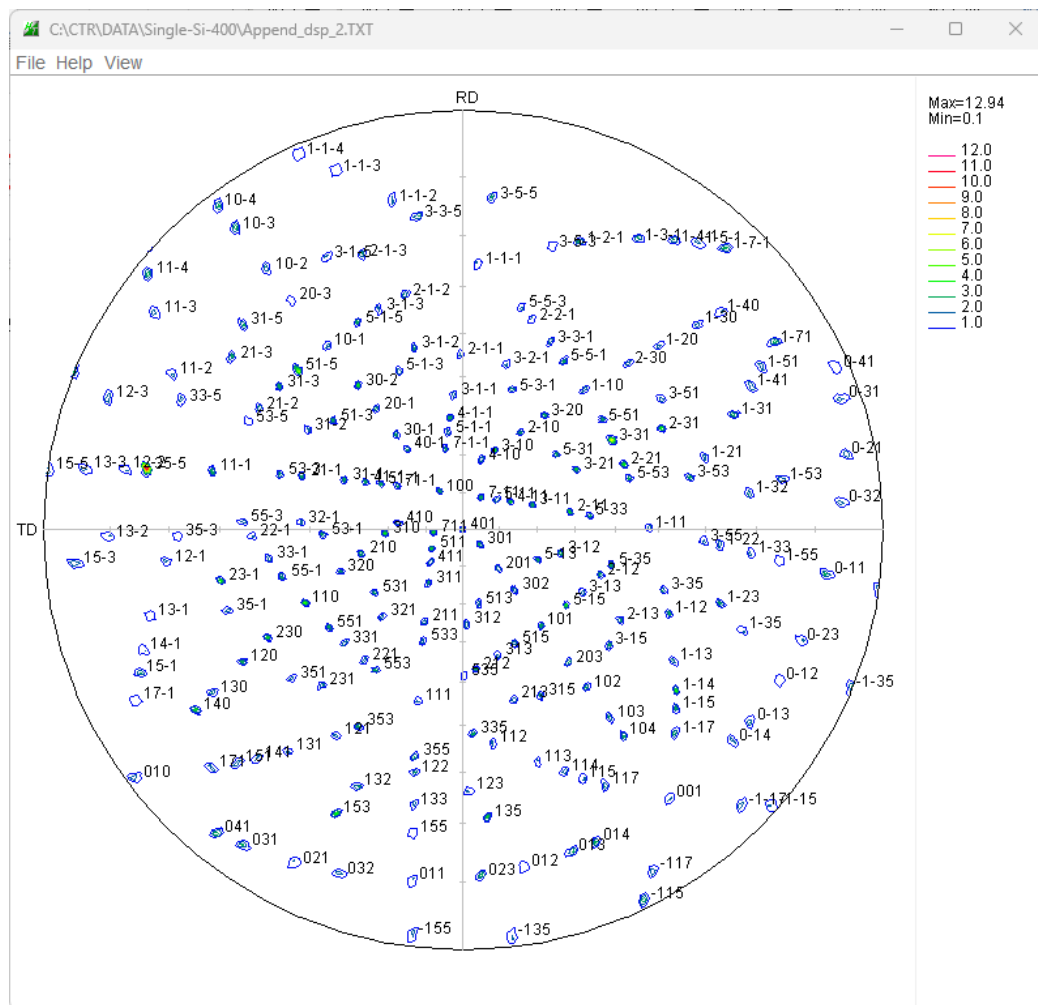
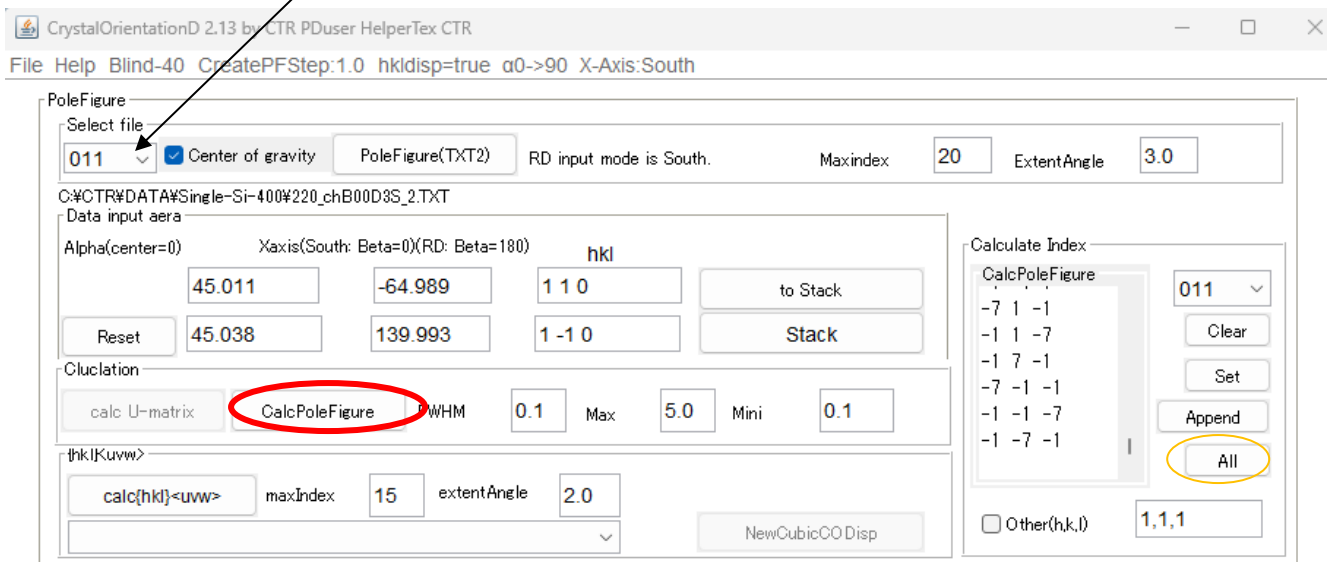
X軸はSouth方向



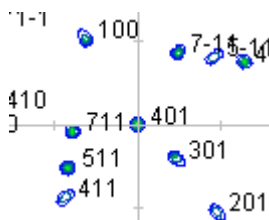
切り出し (α、β) が決定される

#### 4. 4標準ステレオ投影図 (0 1 1)

内臓されている全ての指数を指定し A l l で描画する。更に追加 (A p p e n d) も可能



極点図の中心に  $[4\ 0\ 1]$  → 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 (h k l) [u v w] から選択し、T r i c l i n i c における複数の方位が計算される。

T r i c l i n i c においては、すべて同一である。

しかし、T r i c l i n i c から O r t h o r h o m b i c に変換した場合、同一ではなくなる。

単結晶のODF解析では、T r i c l i n i c 解析で行う。

CrystalOrientationD 2.13 by CTR PDuser HelperTex CTR

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

PoleFigure

Select file  
 ☒ Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is South. Maxindex  ExtentAngle

C:\CTR\DATA\Single-Si-400\220\_chB00D3S\_2.TXT

Data input area

Alpha(center=0) Xaxis(South: Beta=0)(RD: Beta=180) hkl

Cluculation

FWHM  Max  Mini

{hkl}Kuvw>

maxIndex  extentAngle

☐ Other(h,k,l)

Calculate Index

CalcPoleFigure

☐ Other(h,k,l)

89.3	-178.85	1	-3	-4
91.52	179.13	1	-4	-5
90.54	-179.98	2	-7	-9
88.42	178.87	3	-9	-11
89.4	178.24	3	-10	-12
90.16	-179.63	3	-10	-13
90.89	179.7	3	-11	-14
91.5	-178.48	3	-11	-15
88.54	-178.16	4	-11	-15
88.65	179.46	4	-12	-15

{hkl}<uvw>(extentAngle=2.0)

(4 0 1)[3 -10 -12] (308.95 75.96 90.0)

(5 0 1)[1 -4 -5] (308.11 78.69 90.0)

(5 0 1)[3 -11 -15] (305.72 78.69 90.0)

(9 0 2)[2 -7 -9] (307.21 77.47 90.0)

(13 0 3)[3 -10 -13] (306.85 77.01 90.0)

(14 0 3)[3 -11 -14] (307.53 77.91 90.0)

(4 0 1)[1 -3 -4] (306.04 75.964 90.0) TD: [3 17 -12]

(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]

(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]

(4 1 0)[1 -4 3] (36.04 90.0 75.964) TD: [3 -12 -17]

Initialize File

NewCubicCODisp に方位を継続し  
各種解析が可能

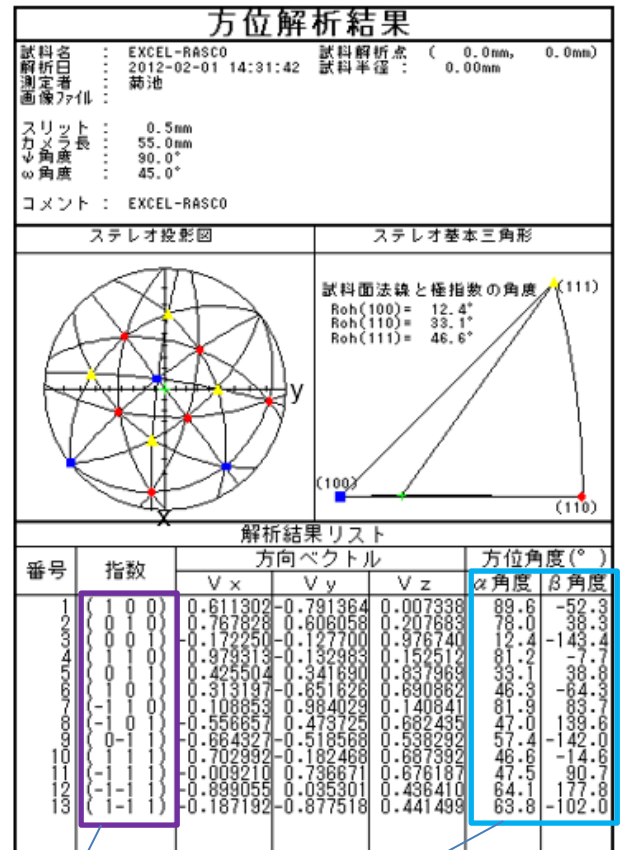
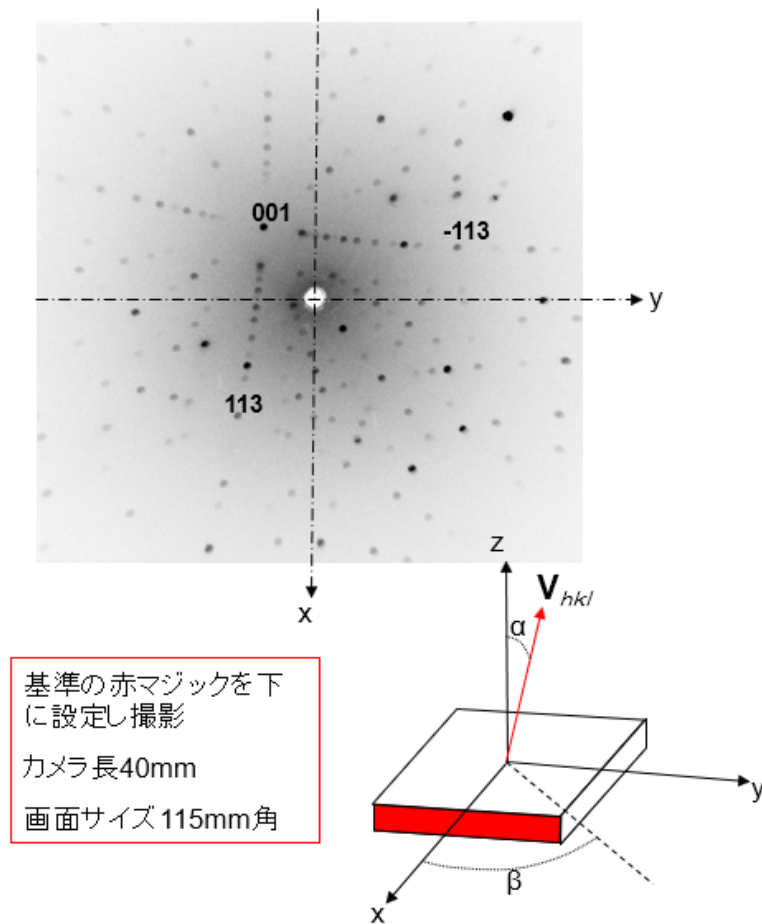
同一極点図が描画される

## 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、S o u t h、E a s tを切り替える。

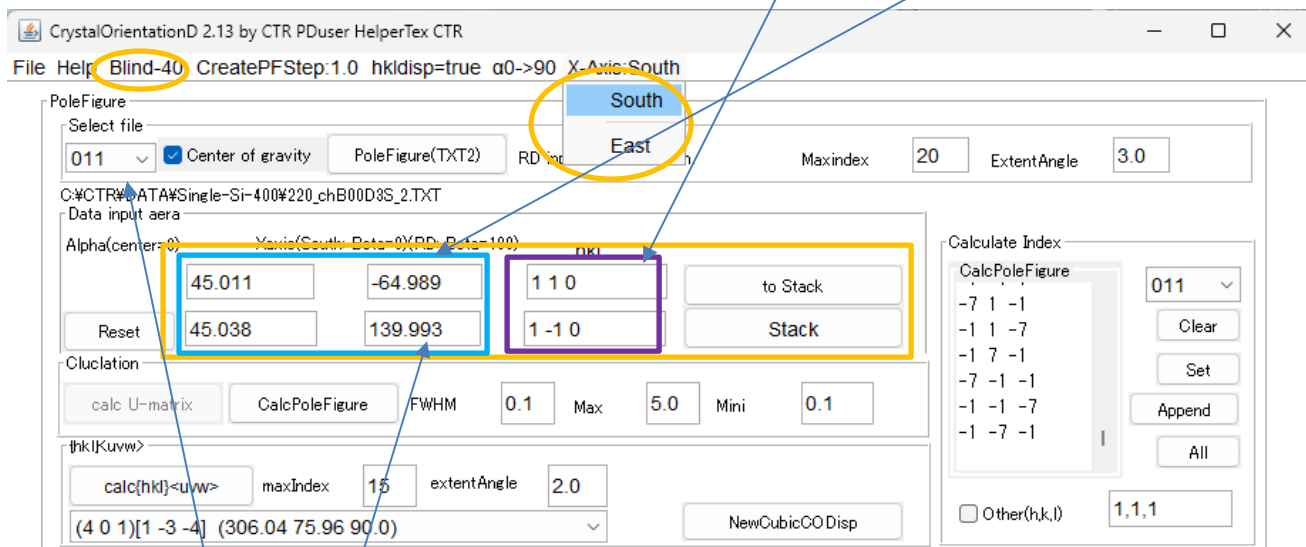
E a s t入力の場合、計算時にS o u t h変換が行われる。

### 背面反射ラウエ法による結晶方位決定



2

## パラメータ



指数は関係なし

方位と位置 (α、β) を入力

## 5. 1 データ入力

$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ 
 $\begin{bmatrix} 0.313197 & -0.651626 & 0.690862 \\ 0.108853 & 0.984029 & 0.140841 \end{bmatrix}$ 
 $\begin{bmatrix} 46.3 & -64.3 \\ 81.9 & 83.7 \end{bmatrix}$

CrystalOrientationD 2.13 by CTR PDuser HelperTex CTR

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

PoleFigure

Select file: 011 ☒ Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is South. Maxindex: 20 ExtentAngle: 3.0

C:\CTR\DATA\Single-Si-400#220\_chB00D3S\_2.TXT

Data input area

Alpha(center=0) Y-axis(South: Beta=0)(RD: Beta=180) HKL

46.3 -64.3 1 0 1

81.9 83.7 -1 1 0

Reset to Stack Stack

Calculation

calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM: 0.5 Max: 100 Mini: 0.1

thkl\Kuw>

calc(hkl)<uvw> maxIndex: 15 extentAngle: 2.0

(0 1 4)[-3 -4 1] (126.04 14.04 0.0) NewCubicCODisp

Calculate Index

CalcPoleFigure 011

0 1 -1

-1 0 1

0 -1 1

-1 0 -1

-1 -1 0

0 -1 -1

Clear Set Append All

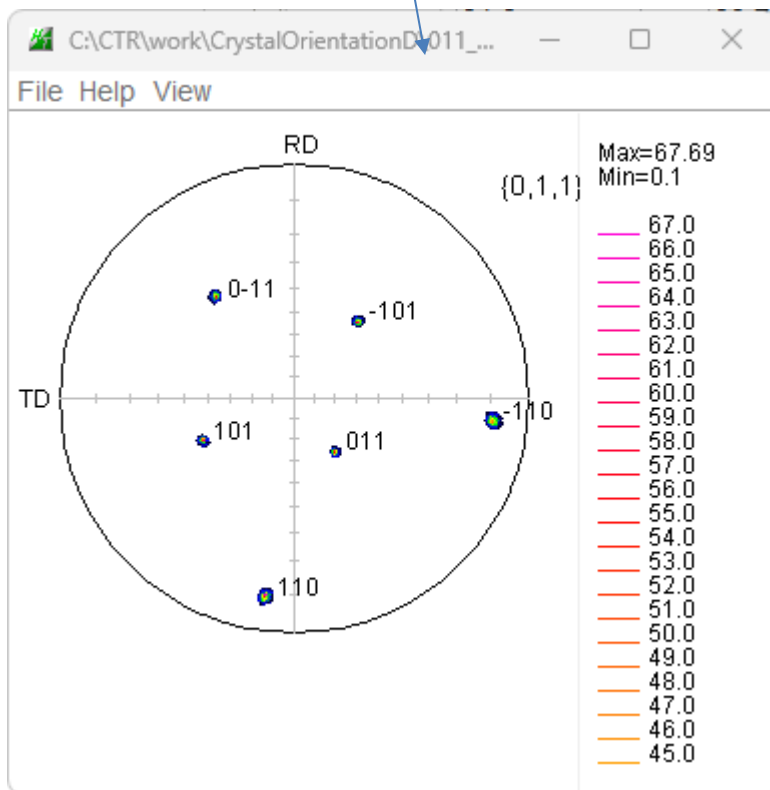
☐ Other(h,k,l) 1,1,1

Alpha	Beta	
46.3	-64.3	1 0 1
81.9	83.7	-1 1 0

U-matrix

0.6121329163533926	0.7725398255791744	-0.16874688326244375
-0.7907548840882648	0.598053301192914	-0.13053324336651
7.75064197082731E-5	0.21334111705745862	0.9769777693302086

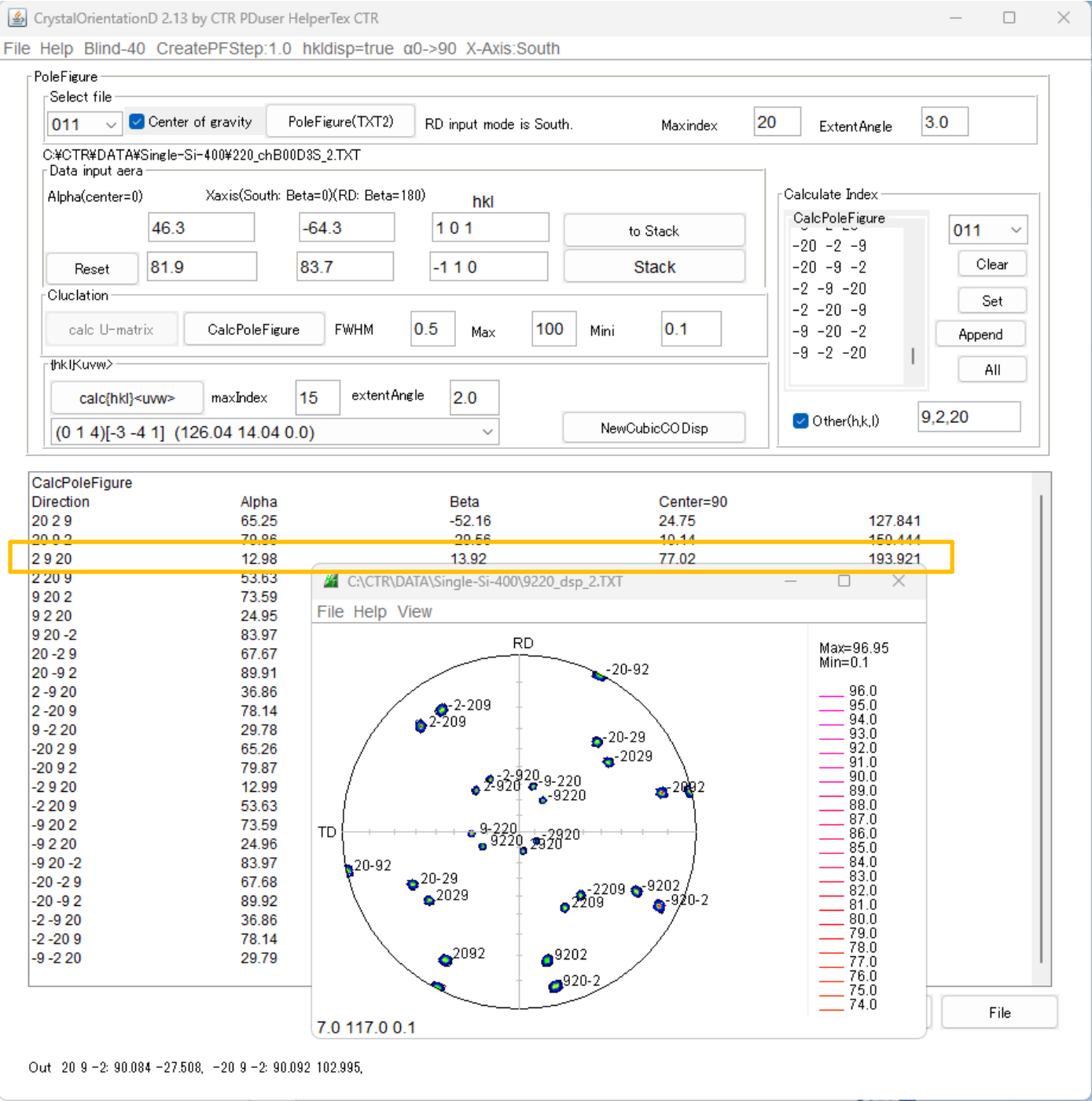
Direction	Alpha	Beta	center=90
1 1 0	81.32	-7.92	8.68
0 1 1	32.68	37.75	57.32
1 0 1	46.3	-64.3	115.7
-1 1 0	81.33	83.41	8.67
-1 0 1	46.31	139.79	43.69
0 -1 1	57.32	-142.26	32.68



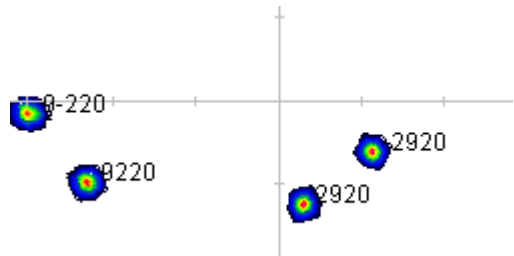
他の指数入力計算でも、同一極点図が表示される。

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

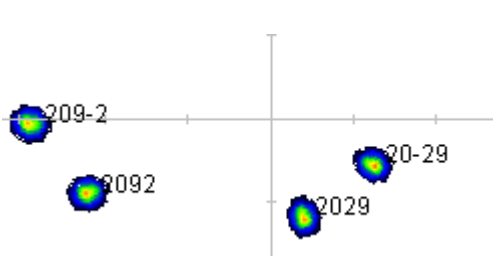
5. 2 ラウエカメラデータから [ 9 , 2 , 2 0 ] 方位計算



ラウエカメラ解析結果



極点図解析結果



指数は異なるが、( $\alpha$ 、 $\beta$ ) 角度は同一です。

## 5. 3 結晶方位解析

CrystalOrientationD 2.13 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Help Blind-40 CreatePFStep:1.0 hkl disp=true  $\alpha 0 \rightarrow 90$  X-Axis:South

PoleFigure

Select file  
 ☒ Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is South. Maxindex  ExtentAngle

Data input area  
 Alpha(center=0)  Xaxis(South: Beta=0)(RD: Beta=180)  hkl

Cluculation  
  FWHM  Max  Mini

{hkl}Kuvw>  
 maxIndex  extentAngle

Calculate Index  
 CalcPoleFigure  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
☐ Other(h,k,l)

chiangle	phiangle	calcuwv
88.61	-178.31	-3 -4 1
90.8	179.63	-4 -5 1
89.83	-179.46	-7 -9 2
91.57	178.89	-9 -11 2
88.67	178.78	-10 -12 3
89.46	-179.11	-10 -13 3
89.48	178.24	-11 -13 3
90.18	-179.79	-11 -14 3

{hkl}<uvw>(extentAngle=2.0)  
 (0 1 4)[-3 -4 1] (126.04 14.04 0.0)  
 (0 1 4)[-10 -12 3] (128.95 14.04 0.0)  
 (0 1 5)[-4 -5 1] (128.11 11.31 0.0)  
 (0 2 9)[-7 -9 2] (127.21 12.53 0.0)  
 (0 2 11)[-9 -11 2] (128.83 10.3 0.0)  
 (0 3 13)[-10 -13 3] (126.85 12.99 0.0)  
 (0 3 13)[-11 -13 3] (129.51 12.99 0.0)  
 (0 3 14)[-11 -14 3] (127.53 12.09 0.0)

(h k l)	(h k l)	TD
(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]
(1 4 0)[-4 1 -3]	(216.04 90.0 14.036)	TD: [-12 3 17]
(1 0 4)[-4 3 1]	(126.04 14.036 90.0)	TD: [-12 -17 3]
(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]

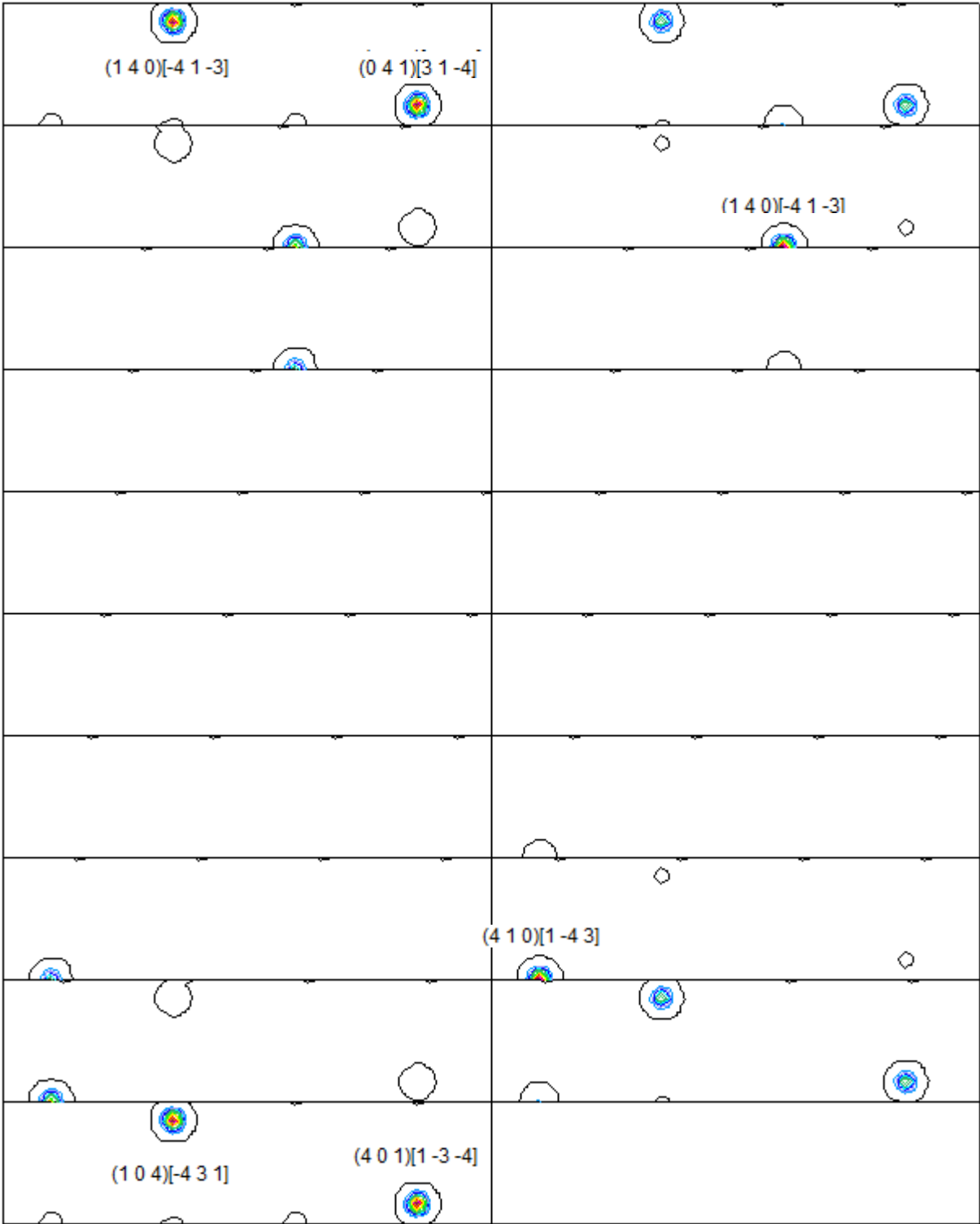
### ラウエカメラ解析結果

(h k l)	(h k l)	TD
(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]
(1 4 0)[-4 1 -3]	(216.04 90.0 14.036)	TD: [-12 3 17]
(1 0 4)[-4 3 1]	(126.04 14.036 90.0)	TD: [-12 -17 3]
(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]

### 極点図解析結果

(h k l)	(h k l)	TD
(4 0 1)[1 -3 -4]	(306.04 75.964 90.0)	TD: [3 17 -12]
(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]
(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]
(4 1 0)[1 -4 3]	(36.04 90.0 75.964)	TD: [3 -12 -17]

6. 解析結果と ODF 図



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)

NewCubicCODisp 1.24 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Help Symmetry Special Index

Miller Ind

(hkl)[uvw]

FWHM

Disp

OBR

01-43TD[3-12-17]

Calc

trueOBR

Mini0.1001Other1.2.3

Disp

Euler Angle

(p1 P p2) <=90

0.054.735645.0

Calc

Present Condition

Euler Angle

Double Miller Indices

DISP

Position10

Disp size400

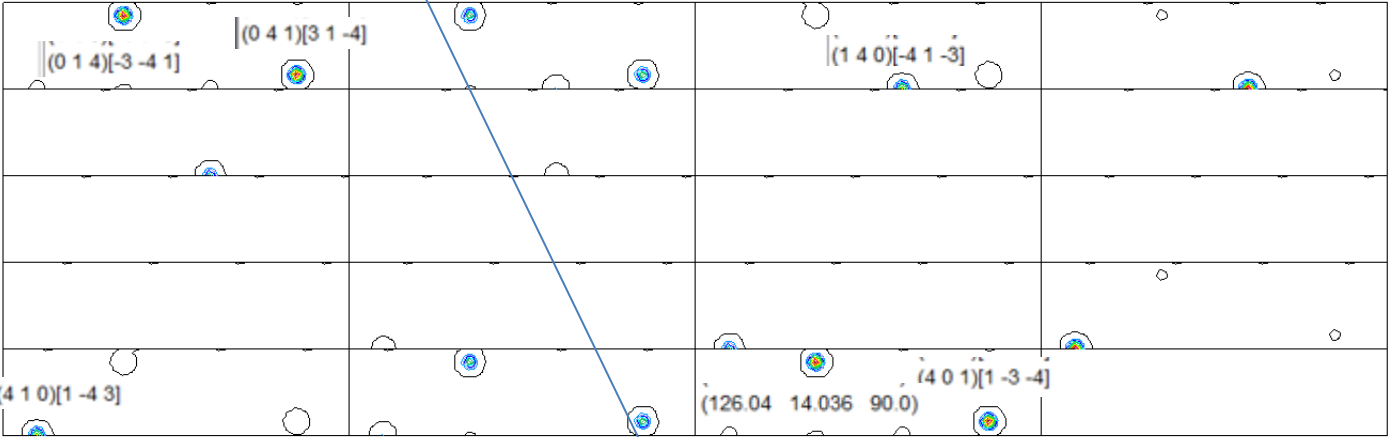
DISP

BG colorBlack

Line size2.0

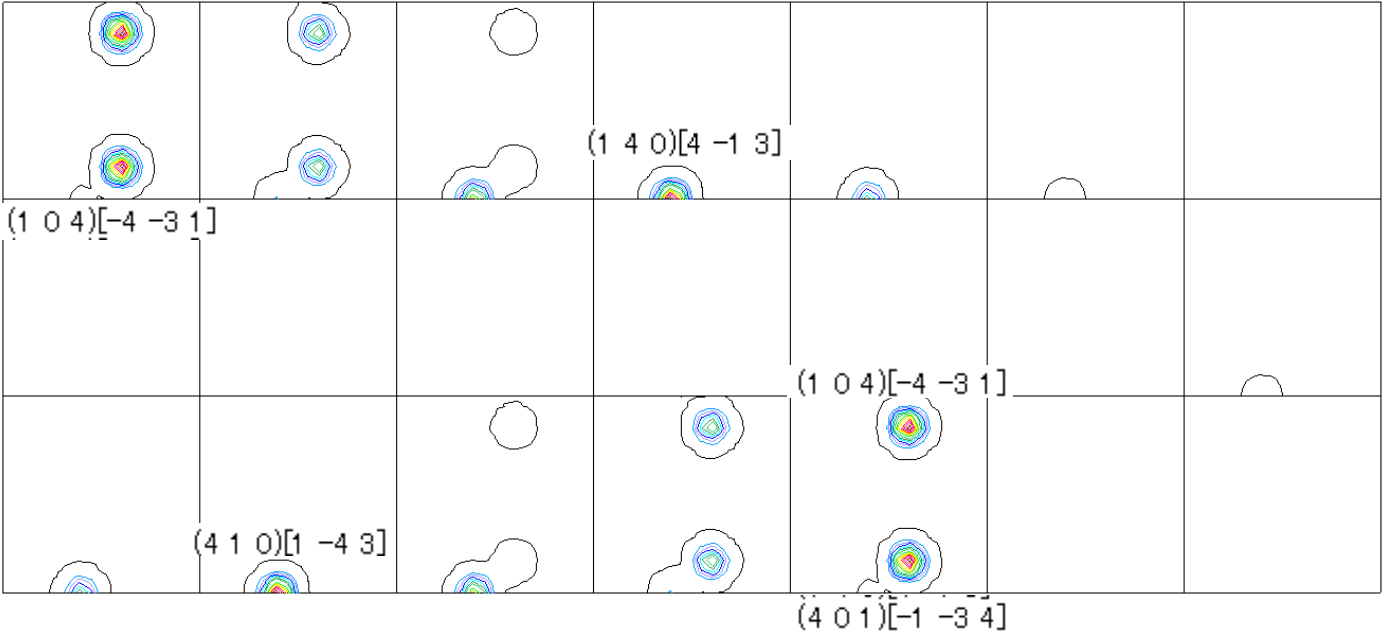
Minus

(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]



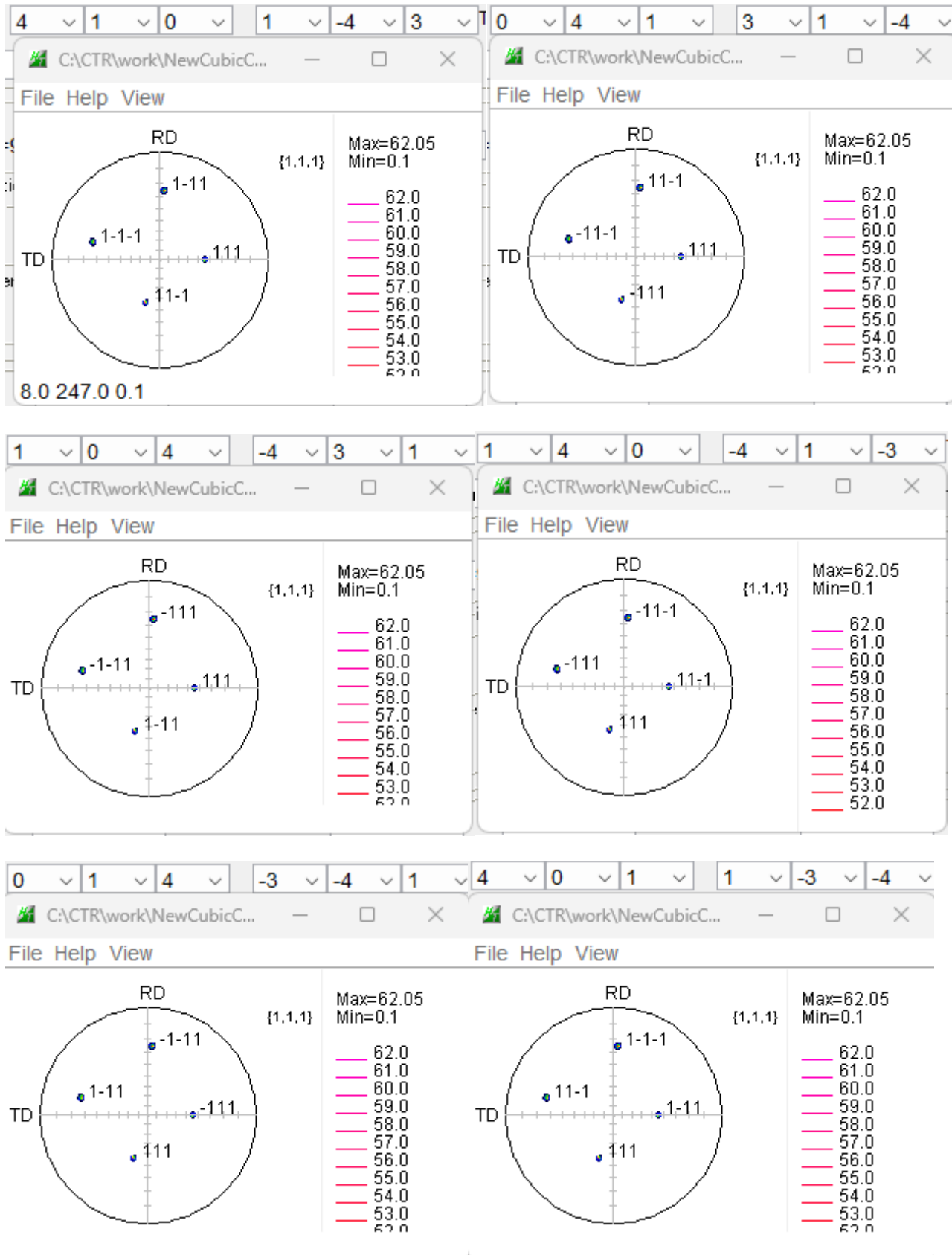
1:	(4 1 0)[1 -4 3]	36.04 90.0 75.964
2:	(1 0 4)[-4 -3 1]	53.96 14.036 90.0
3:	(0 4 1)[3 -1 4]	53.96 75.964 0.0
4:	(1 4 0)[4 -1 3]	36.04 90.0 14.036
5:	(4 0 1)[-1 -3 4]	53.96 75.964 90.0
6:	(0 1 4)[3 -4 1]	53.96 14.036 0.0

(0 1 4)[3 -4 1]



## 7. 1 T r i c l i n i c

(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]

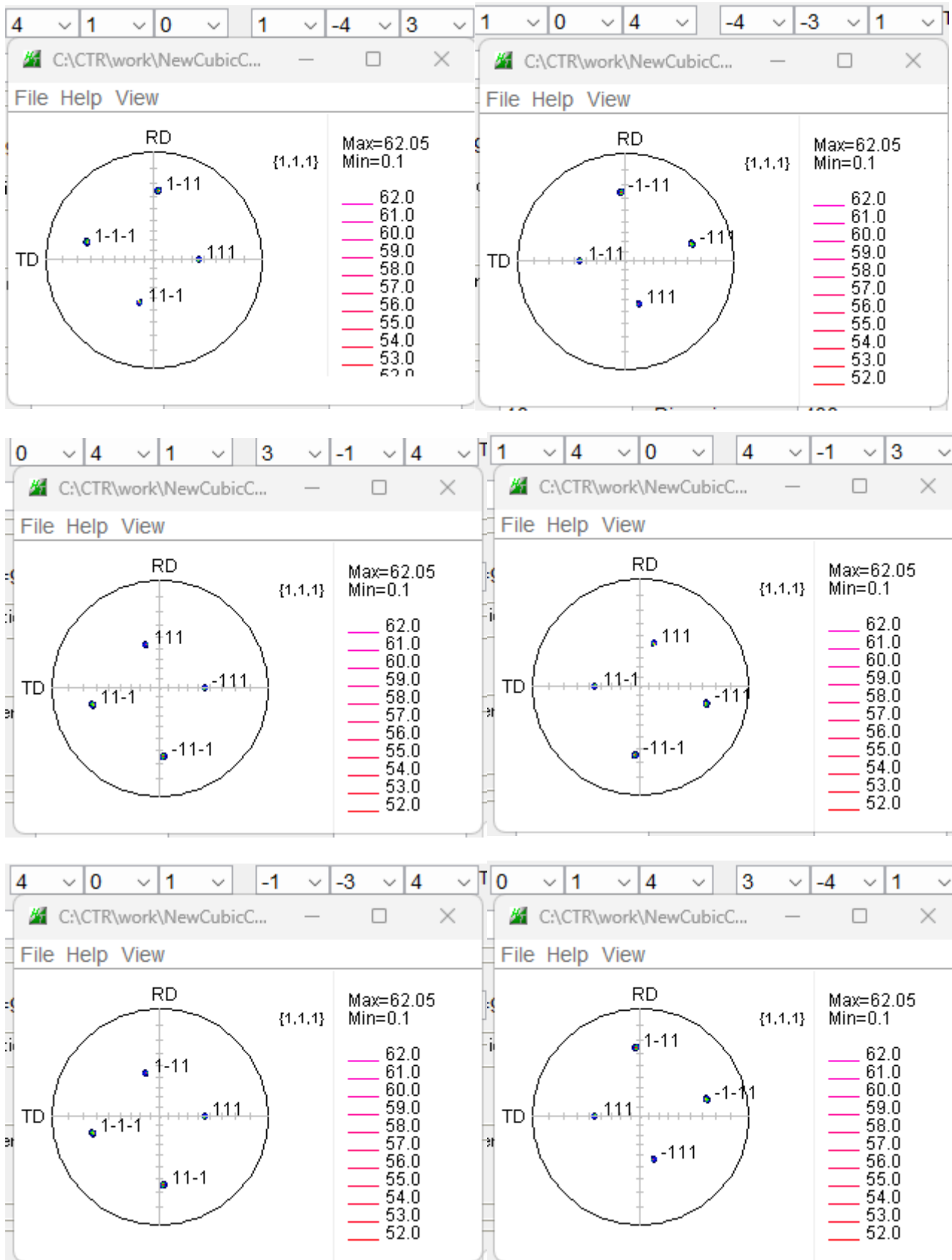


どの方位からでも [9 2 2 0] 方位切り出し角度は同一結果になります。



## 7. 2 Orthorhombic

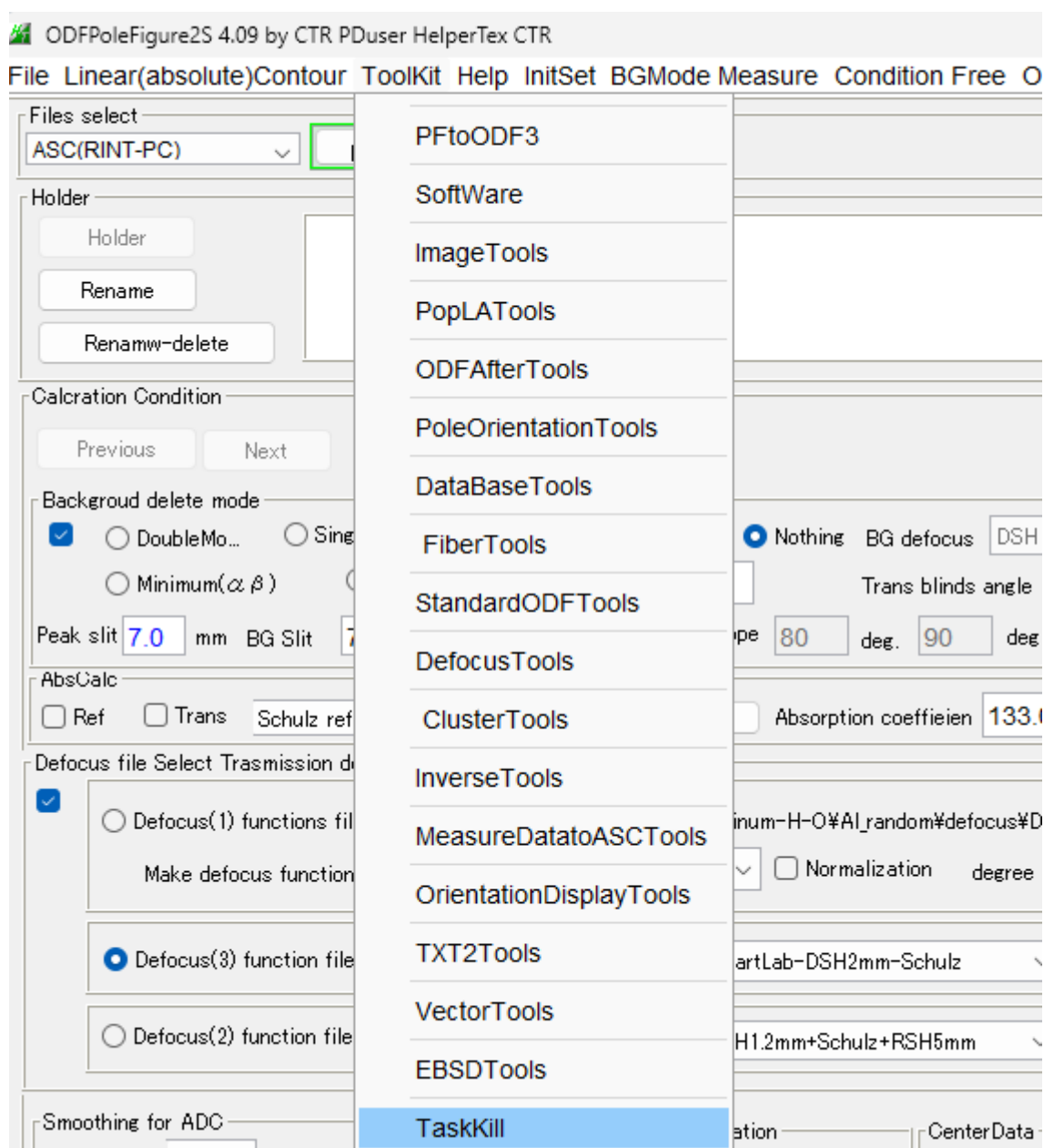
1:	(4 1 0)[1 -4 3]	36.04	90.0	75.964
2:	(1 0 4)[-4 -3 1]	53.96	14.036	90.0
3:	(0 4 1)[3 -1 4]	53.96	75.964	0.0
4:	(1 4 0)[4 -1 3]	36.04	90.0	14.036
5:	(4 0 1)[-1 -3 4]	53.96	75.964	90.0
6:	(0 1 4)[3 -4 1]	53.96	14.036	0.0



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。

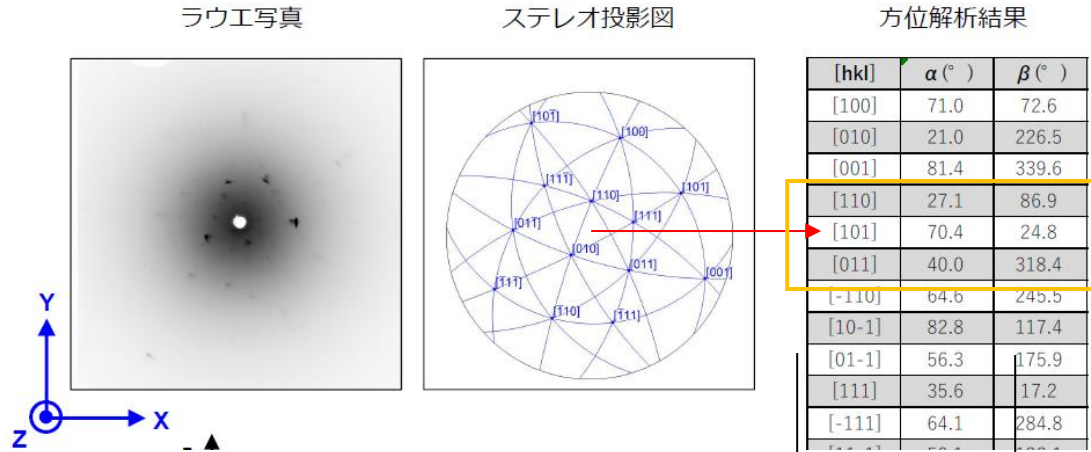
## 注意

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

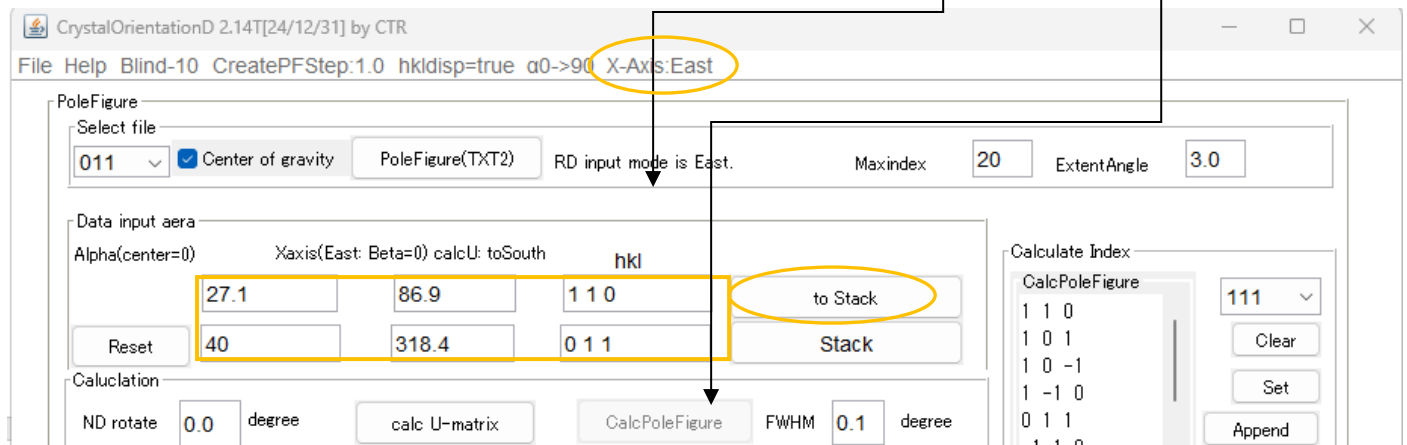


## 8. ND rotateの使い方

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。

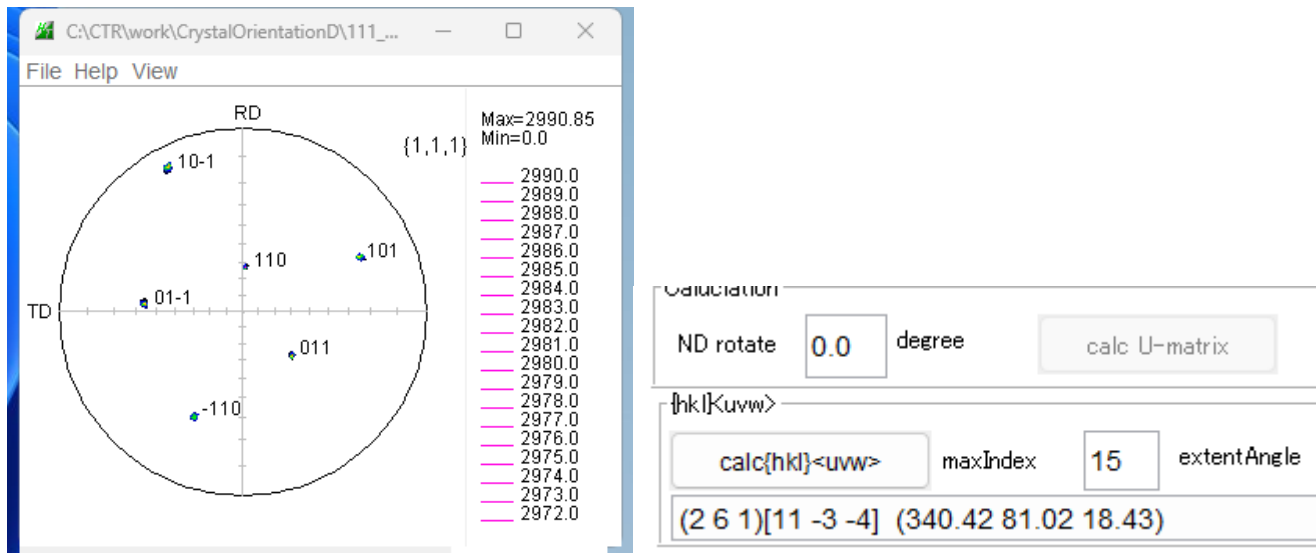


入力は



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



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

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

File Help Blind-10 CreatePFStep:1.0 hkl disp=true  $\alpha_0 \rightarrow 90$  X-Axis:East

PoleFigure

Select file  
011 ☒ Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is East. Maxindex 20 ExtentAngle 3.0

Data input area  
Alpha(center=0) Xaxis(East: Beta=0) calcU: toSouth hkl  
27.1 86.9 1 1 0 to Stack  
Reset 40.0 318.4 0 1 1 (110)[011]

Calculation  
ND rotate -90 degree **calc U-matrix** CalcPoleFigure FWHM 0.2 degree

Calculate Index  
CalcPoleFigure 011  
0 1 -1  
-1 0 1  
0 -1 1  
-1 0 -1  
-1 -1 0  
0 -1 -1  
Clear Set Append

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

File Help Blind-10 CreatePFStep:1.0 hkl disp=true  $\alpha_0 \rightarrow 90$  X-Axis:East

PoleFigure

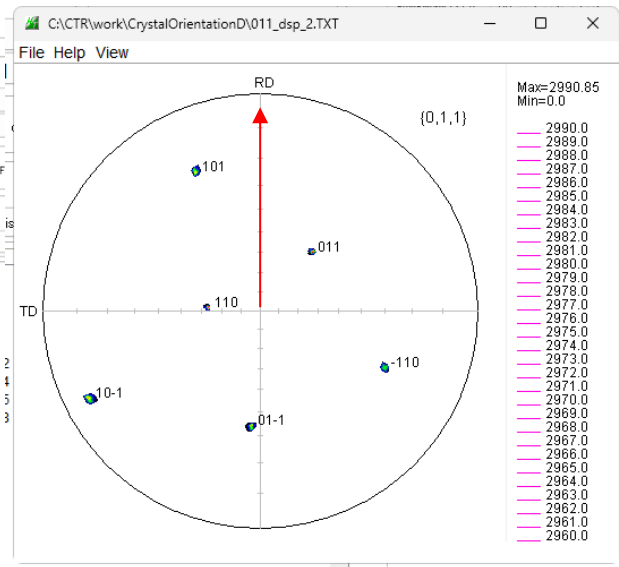
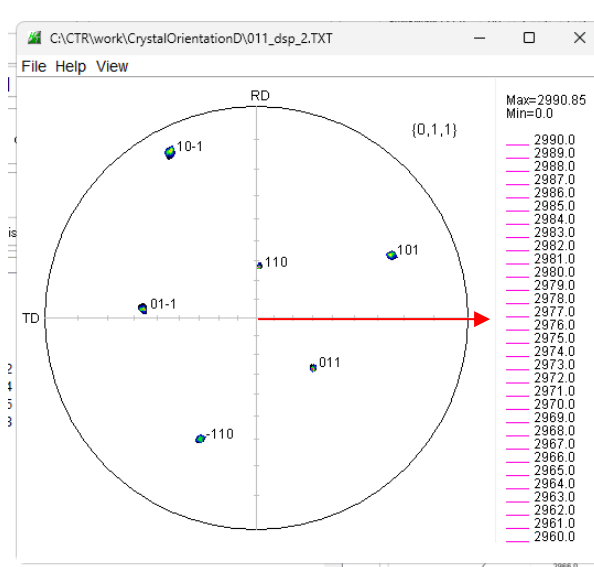
Select file  
011 ☒ Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is East. Maxindex 20 ExtentAngle 3.0

Data input area  
Alpha(center=0) Xaxis(East: Beta=0) calcU: toSouth hkl  
27.1 -93.1 1 1 0 to Stack  
Reset 40.0 138.4 0 1 1 (110)[011]

Calculation  
ND rotate -90 degree calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM 0.2 degree

hkl<uvw>  
calc[hkl]<uvw> maxIndex 15 extentAngle 2.0  
(3 8 1)[4 -3 12] (68.34 83.32 20.56) NewCubicCODisp

Calculate Index  
CalcPoleFigure 011  
0 1 -1  
-1 0 1  
0 -1 1  
-1 0 -1  
-1 -1 0  
0 -1 -1  
Clear Set Append All  
☐ Other(h,k,l) 1,1,1



## 9. 指数表示時、等高線をドットに変更し高速化

CrystalOrientationD 2.15T[25/12/31] by CTR

File Help Blind-10 CreatePFStep:1.0 hkdisp=true a0->90 X-Axis:South

PoleFigure

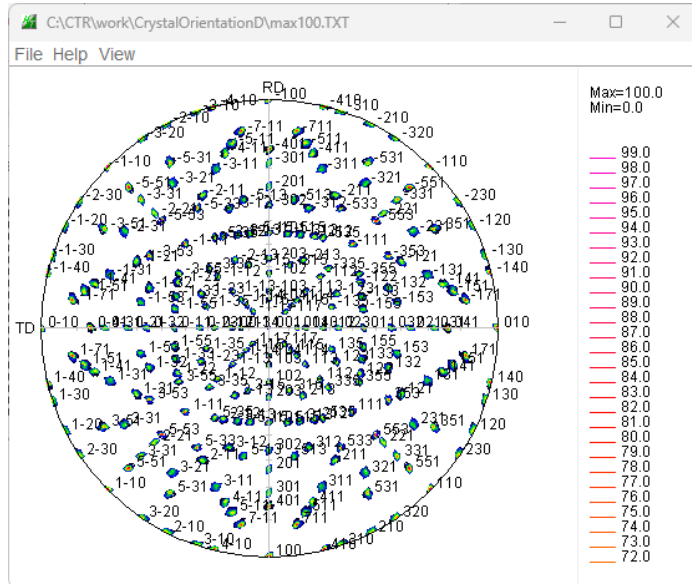
Select file  
001 Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is South. Maxindex 20 ExtentAngle 3.0

Data input area  
Alpha(center=0) 0 Xaxis(South: Beta=0)(RD: Beta=180) 0 hkl 0 0 1 to Stack  
Reset 90 180 -1 0 0 Stack

Calculation  
ND rotate 0.0 degree calc U-matr... notContour CalcPoleFigure FWHM 0.1 degree

hkl(Kuvw)  
calc(hkl)<uvw> maxindex 15 extentAngle 2.0  
NewCubicCO Disp

Calculate Index  
CalcPoleFigure 001  
-7 1 -1  
-1 1 -7  
-1 7 -1  
-7 -1 -1  
-1 -1 -7  
-1 -7 -1  
Other(h,k,l) 1,1,1



alculation

ND rotate 0.0 degree calc U-matr... notContour CalcPoleFigure

