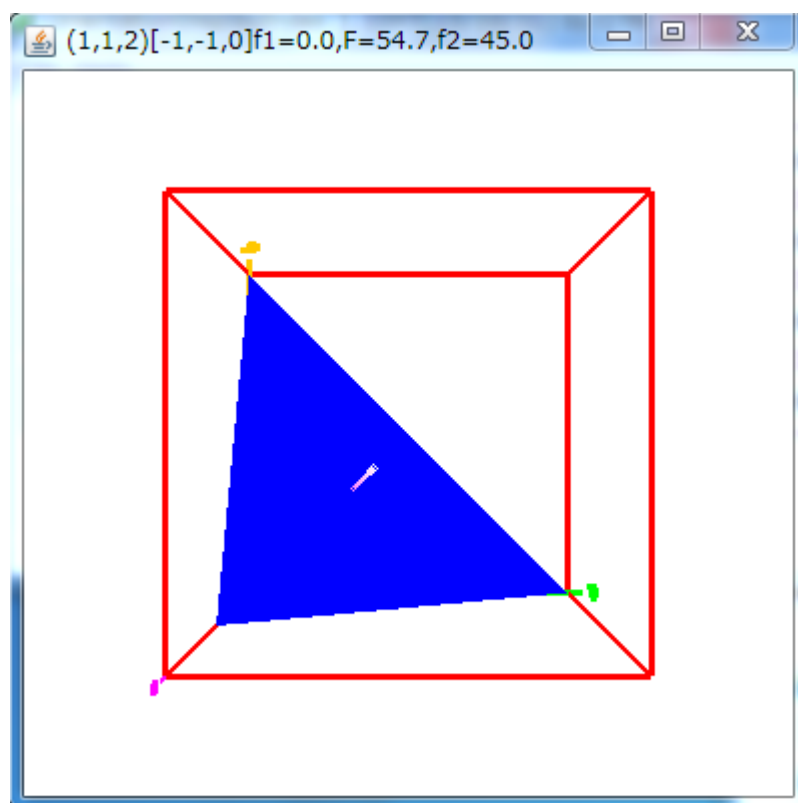


結晶方位表示のための

C r y s t a l O r i e n t a t i o n D i s p

Ver.2.11M



2025年02月04日



*HelperTex Office*

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

操作上、不明な点、おかしい挙動がある場合、問い合わせ下さい。

*Version 2.00	2015/01/05	NewCubicCODisp に Tetoranal,Orthorombic 追加
*Version 2.01	2015/01/10	最大指数 9 9、{h,k,l}<u,v,w>表示
*Version2.02	2015/01/13	Hexagonal 選択では HexaConvert を起動
*Version2.03	2015/01/25	GPODFDisplay との連携
*Version2.06	2022/01/24	eulerangle(xx,0,0)対応
*Version2.07	2022/06/10	retuireStructure Strcuture.txt に Strcture2.txt(real)追加
*Version2.08	2024/12/26	計算極点図の描画
*Version2.10	2025/01/16	表示 Triclinic->Orthorhombic 確認
*Version 2.11	2025/02/04	CrstalOrientationDisp と連携

## 目次

1. 概要
2. 計算式
3. ソフトウェアの使い方
4. 外部起動
5. Polyethylene
6. Hexagonal
7. GPODFDisplayとの連携
8. 極点図の描画
  8. 1 Cubic
  8. 2 Tetragonal
  8. 3 Orthorhombic
9. CrystalOrientationと連携
  9. 1 CrystalOrientationDispで確認
  9. 2 PFRotationで確認

## 1. 概要

ODF解析を行い、結晶方位が決まった時、その状態を他人に説明する事が困難な事がある。

そのような時、図で示せると便利である。

本ソフトウェアは、Cubic, Tetragonal, Orthorombicに限るが(hkl)[uvw]を入力する事で結晶方位図を表示出来し、報告書に画像を貼り付けて説明する為に作成された。

Hexagonalが選択された場合、HexaConvertを起動する。

従来のNewCubicCODispと同じ機能である。

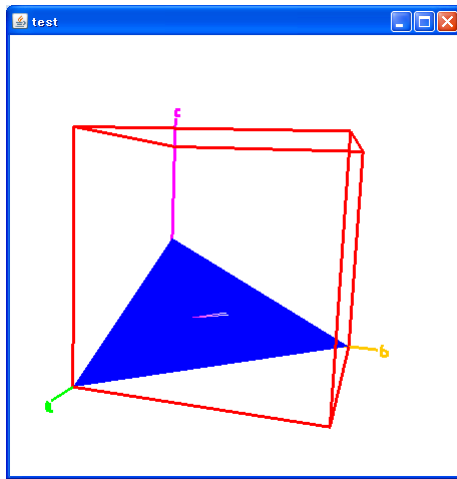
入力部分と、表示部分を別ソフトウェアで作成しているが、表示機能も取り込んだ。

ただし計算部分を別のアルゴリズムで作成した。

本アルゴリズムは、ODFEulerAngleソフトウェアで開発した物を流用した。

表示プログラム(Disp3DTriclinic2.jar)

単独では(112)[1-10]を表示する。



緑軸：結晶のa軸      黄軸：結晶のb軸      紫軸：結晶のc軸

材料面：青色の面（裏側は紫の面）      RD方向：材料面に表示している方向

## 2. 計算式

格子定数 (a, b, c, 90, 90, 90)

Euler角度をBunge ( $\phi_1, \Phi, \phi_2$ )  $\rightarrow$  結晶方位 {hkl} <uvw> の関係

$$h * a = n * \sin \Phi * \sin \phi_2$$

$$k * b = n * \sin \Phi * \cos \phi_2$$

$$l * c = n * \cos \Phi$$

$$u / a = m * (\cos \phi_1 * \cos \phi_2 - \sin \phi_1 * \sin \phi_2 * \cos \Phi)$$

$$v / b = m * (-\cos \phi_1 * \sin \phi_2 - \sin \phi_1 * \cos \phi_2 * \cos \Phi)$$

$$w / c = m * \sin \phi_2 * \sin \Phi$$

$$\{hkl\} \langle uvw \rangle \rightarrow (\phi_1, \Phi, \phi_2)$$

$$H = h / a, K = k / b, L = l / c, U = u * a, V = v * b, W = w * c$$

$$\cos \Phi = L / \sqrt{H^2 + K^2 + L^2}$$

$$\cos \phi_2 = K / \sqrt{H^2 + K^2}$$

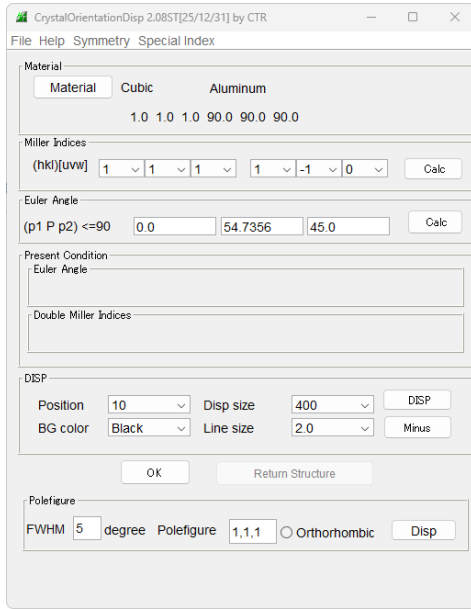
$$\sin \phi_1 = W / X * Y$$

$$X = \sqrt{U^2 + V^2 + W^2}$$

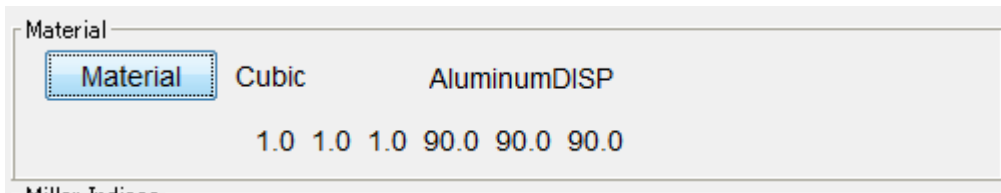
$$Y = \sqrt{(H^2 + K^2 + L^2) / (H^2 + K^2)}$$

### 3. ソフトウェアの使い方

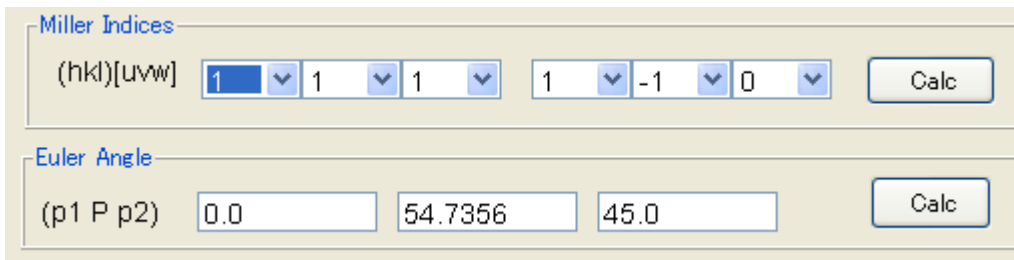
ODFPoleFigure2->TooKit->OrientationDisplay-CrystalOrientationDisp  
C:\¥CTR¥bin¥NewCrystalOrientationDisp.jar



#### 結晶系の指定

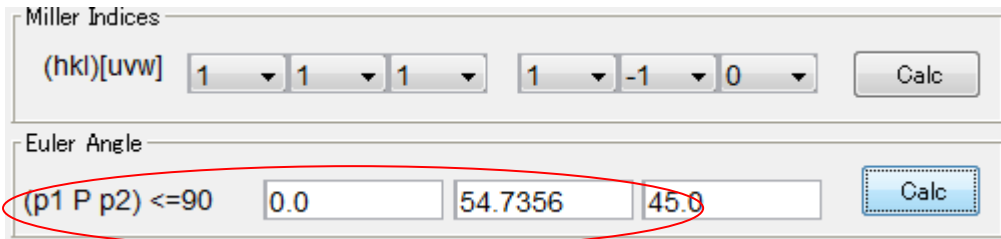


(hkl)[uvw] 或いは Euler 角度を入力する。

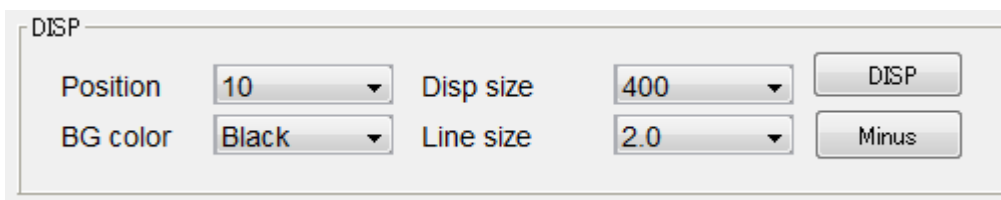


例えば

(-111)[110]を入力して横の Calc で Euler 角度を計算する。

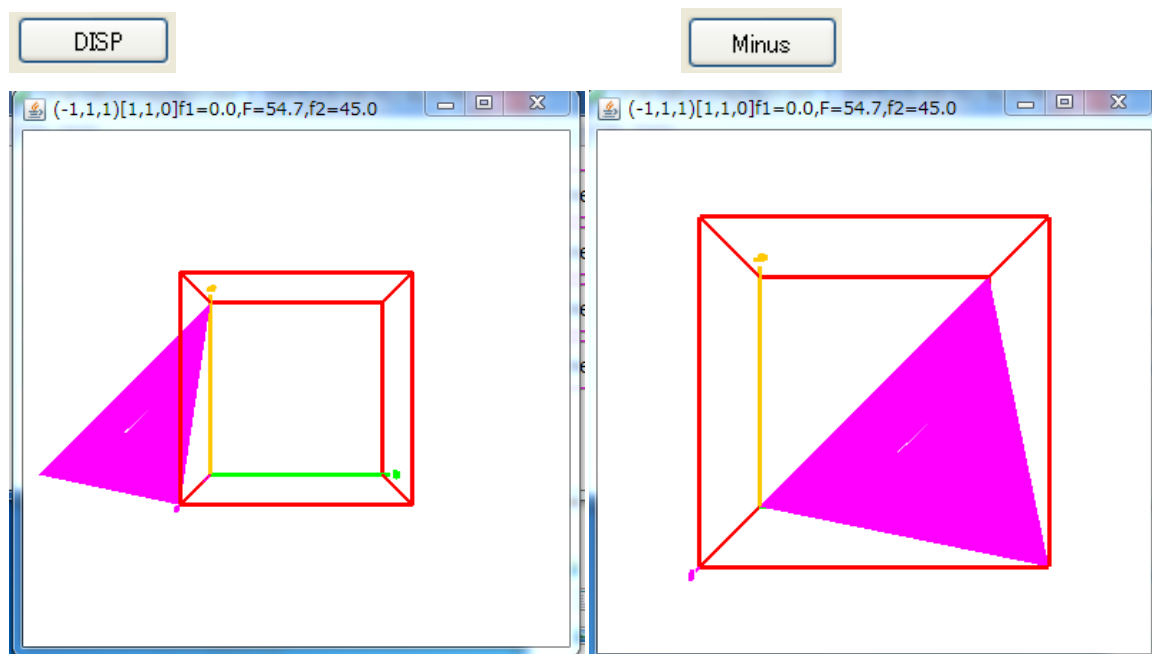


Euler 角度が表示される。DISP の DISP で結晶方位図が表示される。



DISP 中の Position,Disp size,BG color,Line size は表示パラメータです。

画面上でマウス操作をすると、結晶方位の表示が変化する。



Minus 操作でユニットセルの変更が可能になります。

Euler 角度の入力

(0.0 43.0 0.0)を入力

Euler Angle  
(p1 P p2) <=90

Euler 角度の横の Calc で計算

Miller Indices  
(hkl)[uvw]

Euler Angle  
(p1 P p2) <=90

Present Condition  
Euler Angle  
0.0 43.0 0.0

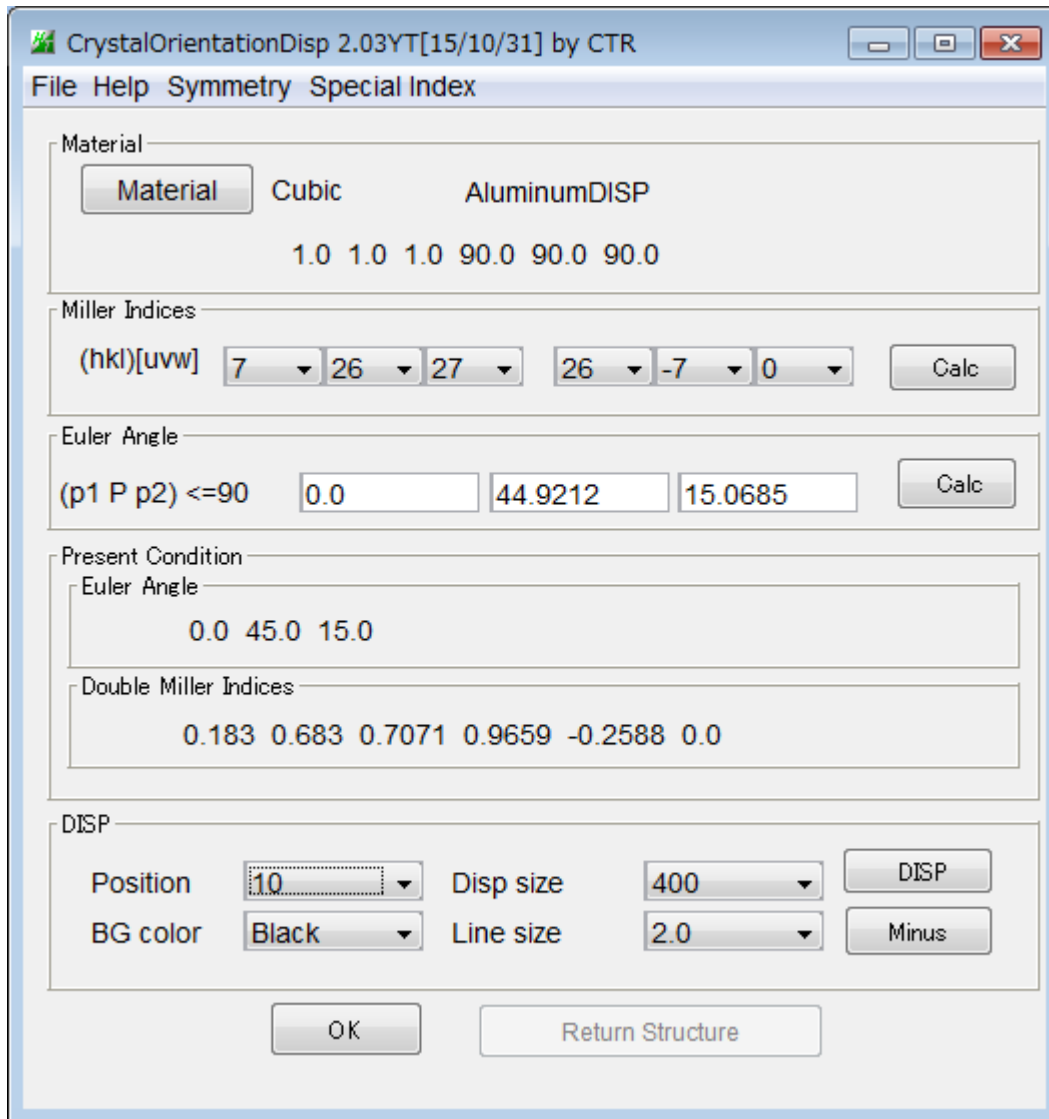
Double Miller Indices  
0.0 0.682 0.7314 1.0 0.0 0.0

入力された Euler 角度、double の指数を表示し

結晶方位を整数化し、その整数化した結晶方位に対する Euler 角度が表示される。  
この計算部分を ODF Euler Angle ソフトウェアで作成した。

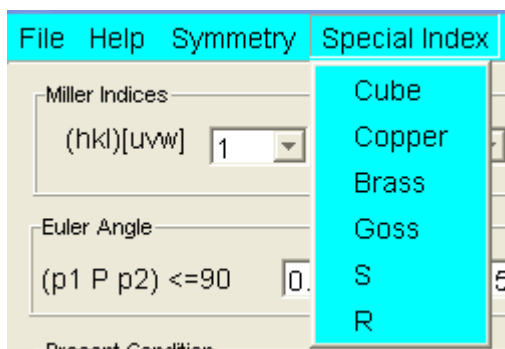
#### 4. 外部起動

```
java -jar c:/CTR/bin/NewCubicCODisp.jar EULER F1 F F2
```



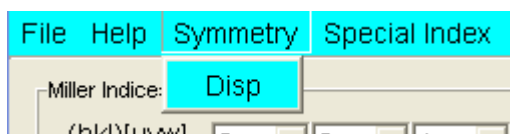
EULER 0.0 45.0 15.0 で起動された場合

特別に登録されている方位と対称性



選択で方位を設定する

対称方位を表示



### C u b e の方位と対称性

Miller Indices  
 (hkl)[uvw]

Euler Angle  
 (p1 P p2) <=90

1:	(0 0 1)[1 0 0]	0.0	0.0	0.0
2:	(0 1 0)[1 0 0]	0.0	90.0	0.0
3:	(0 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	0.0
4:	(0 0 1)[0 -1 0]	90.0	0.0	0.0
5:	(0 0 1)[0 -1 0]	0.0	0.0	90.0
6:	(1 0 0)[0 -1 0]	0.0	90.0	90.0
7:	(1 0 0)[0 0 1]	90.0	90.0	90.0
8:	(0 0 1)[-1 0 0]	90.0	0.0	90.0

### C o p p e r 方位

Miller Indices  
 (hkl)[uvw]

Euler Angle  
 (p1 P p2) <=90

1:	(1 1 2)[-1 -1 1]	90.0	35.264	45.0
2:	(1 2 1)[1 -1 1]	39.232	65.905	26.565

### B r a s s 方位

Miller Indices  
 (hkl)[uvw]

Euler Angle  
 (p1 P p2) <=90

1:	(1 1 0)[1 -1 2]	54.736	90.0	45.0
2:	(1 0 1)[-1 -2 1]	35.264	45.0	90.0
3:	(0 1 1)[2 -1 1]	35.264	45.0	0.0



### G o s s 方位

Miller Indices  
 (hkl)[uvw]

Euler Angle  
 (p1 P p2) <=90

1:	(1 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	45.0
2:	(1 0 1)[0 -1 0]	0.0	45.0	90.0
3:	(0 1 1)[1 0 0]	0.0	45.0	0.0

### S 方位

Miller Indices  
 (hkl)[uvw]

Euler Angle  
 (p1 P p2) <=90

1:	(1 3 2)[6 -4 3]	27.032	57.688	18.435
2:	(2 1 3)[-3 -6 4]	58.98	36.699	63.435
3:	(2 3 1)[3 -4 6]	52.866	74.499	33.69

### R 方位

Miller Indices  
 (hkl)[uvw]

Euler Angle  
 (p1 P p2) <=90

1:	(2 1 3)[-1 -4 2]	46.911	36.699	63.435
2:	(1 3 2)[4 -2 1]	14.963	57.688	18.435
3:	(2 3 1)[1 -2 4]	64.934	74.499	33.69

## 5. Polyethylene

PolyethyleneはOrthorhombicであり、格子定数は

```

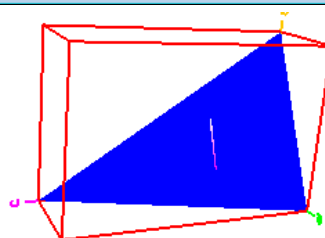
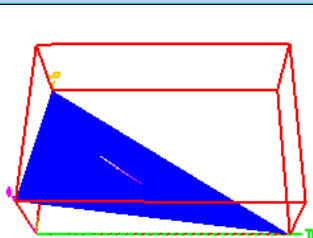
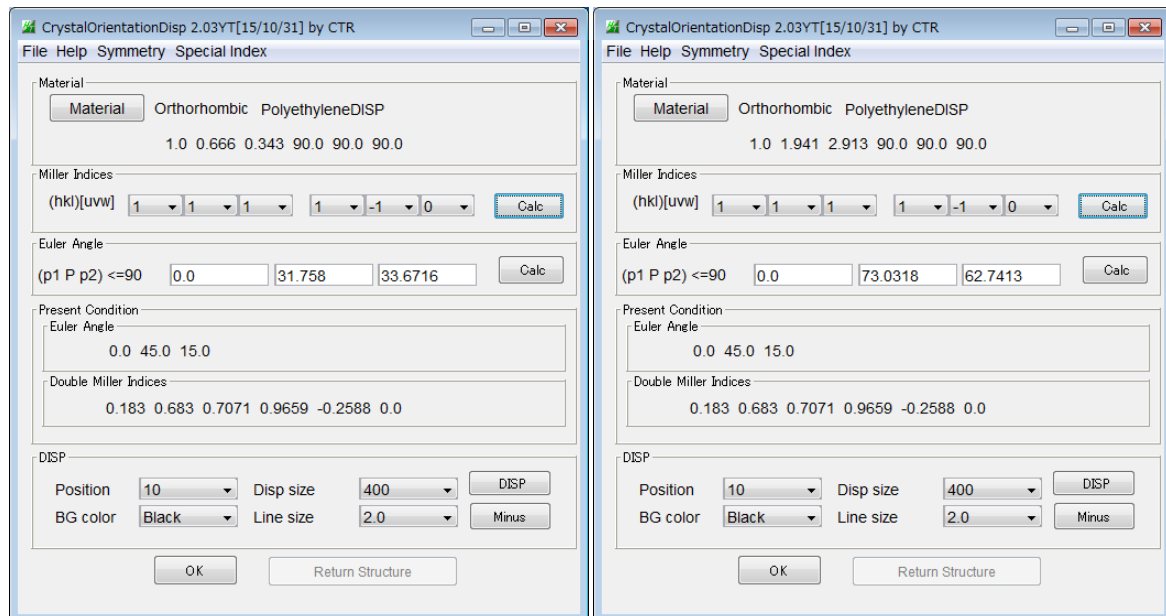
PolyethyleneDISP
Orthorhombic
7.4      (1.0)
4.93     (0.6662)
2.54     (0.3432)
90.0
90.0
90.0
1.54056
9
1      1      0      100.0    4.1029    21.642
2      0      0      35.0     3.7       24.032
2      1      0      5.0      2.9593    30.175
0      2      0      20.0     2.465     36.418
0      1      1      25.0     2.2579    39.893
3      1      0      20.0     2.206     40.875
1      1      1      20.0     2.1596    41.792
    
```

しかし、LaboTexの場合、Z軸に最長の軸を合わせる為、

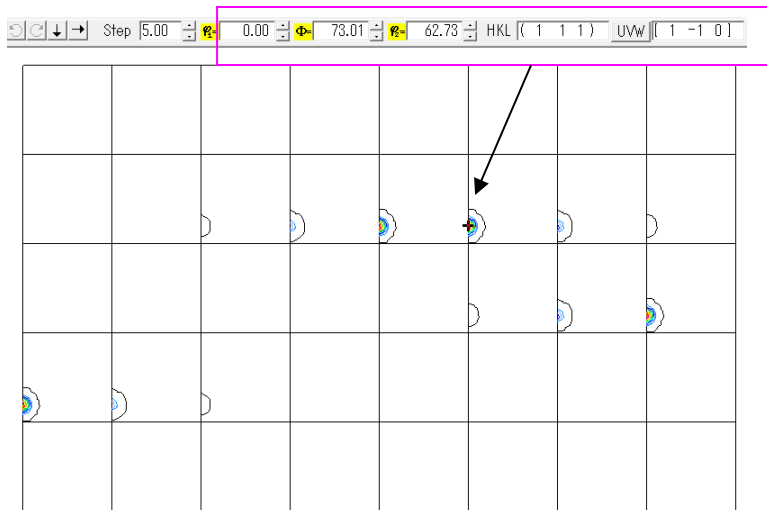
```

PolyethyleneDISP
Orthorhombic
2.54     (1.0)
4.93     (1.9409)
7.4      (2.9134)
90.0
90.0
90.0
1.54056
9
0      1      1      100.0    4.1029    21.642
0      0      2      35.0     3.7       24.032
0      1      2      5.0      2.9593    30.175
0      2      0      20.0     2.465     36.418
1      1      0      25.0     2.2579    39.893
0      1      3      20.0     2.206     40.875
1      1      1      20.0     2.1596    41.792
    
```

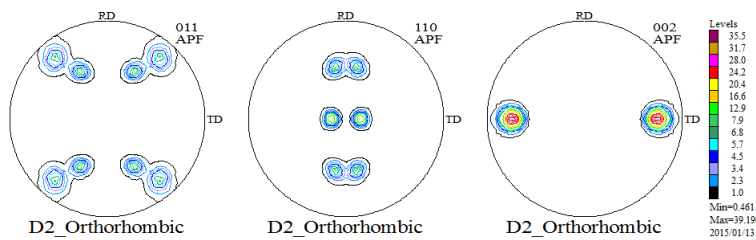
と表現されます。同じ(111)[1-10]でも Euler 角度は異なります。



Labotexによる(111)[1-10] (0.0,73.01,62.73)



PFExport



TextToolsの為に、指数入れ替え(011->110,110->011,002->200)

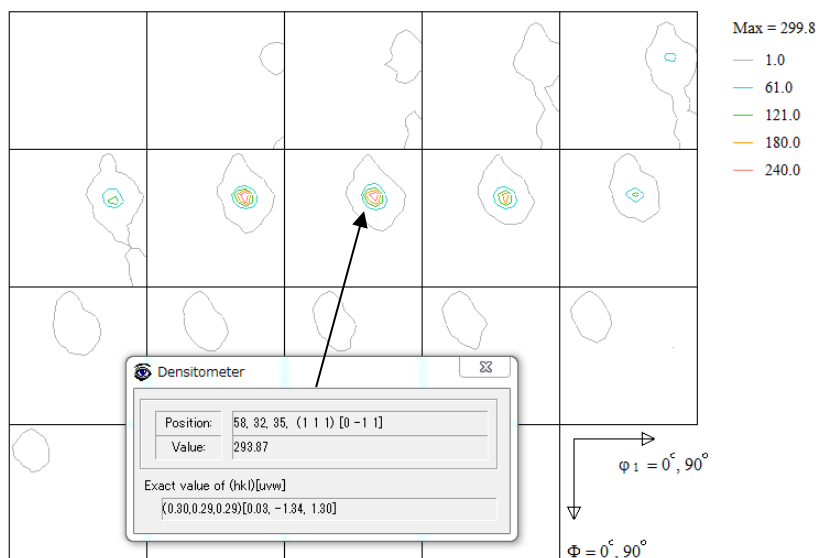
Material: Polyethylene.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 3 - D2 (orthorhombic)

a: 1.0, b: 0.6662, c: 0.3432, alpha: 90.0, beta: 90.0, gamma: 90.0

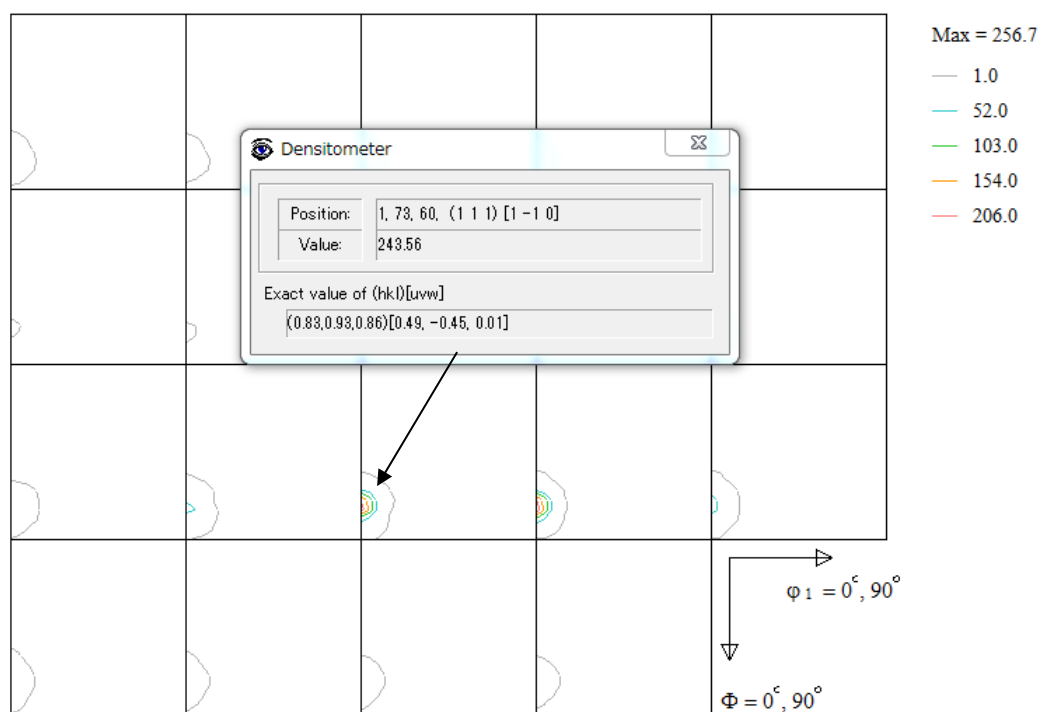
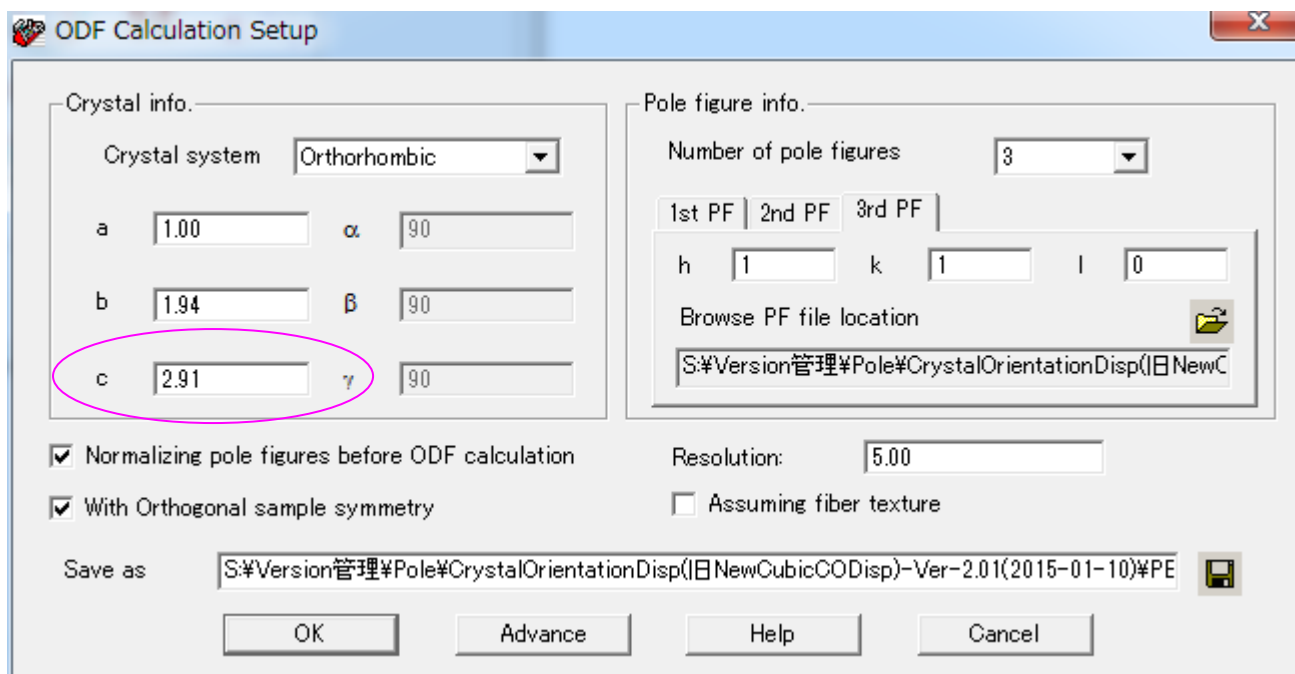
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
002_labotex-rp_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
011_labotex-rp_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
110_labotex-rp_2.TXT	0,1,1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>

Labotexの(111)[1-10]をTextToolsで読み込み



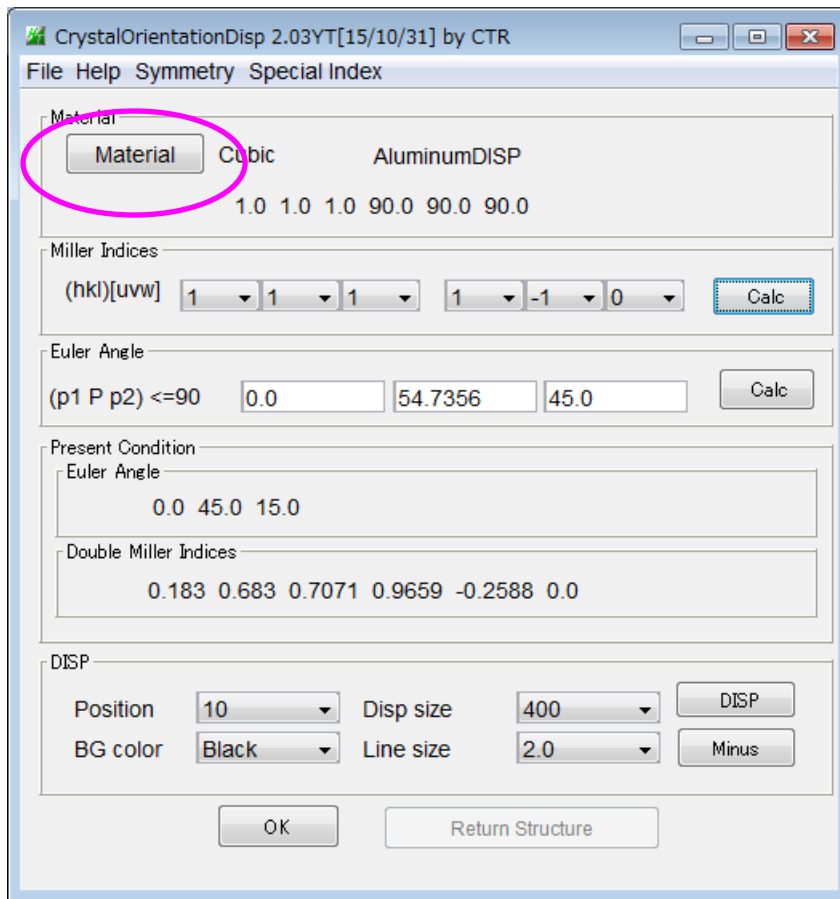
(111)[0-11]として計算される。

L a b o T e x と同様に Z 軸に最長軸を合わせた計算を T e x T o o l s で解析

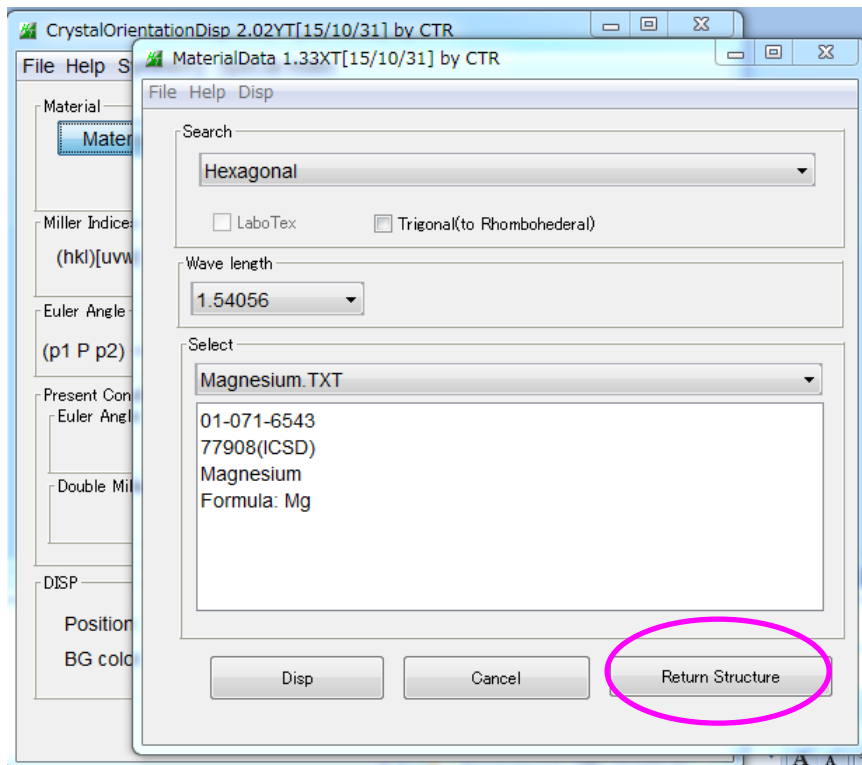


L a b o T e x と同様に、(111)[1-10]として計算される。

## 6. Hexagonal

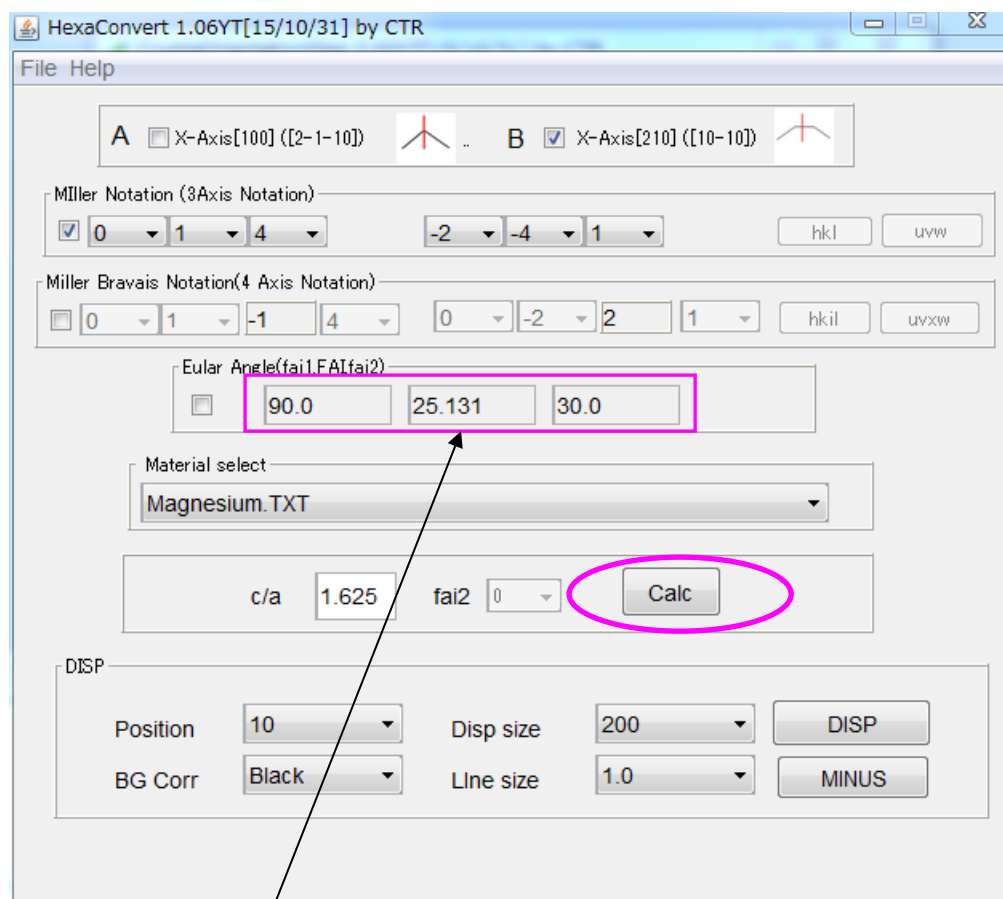
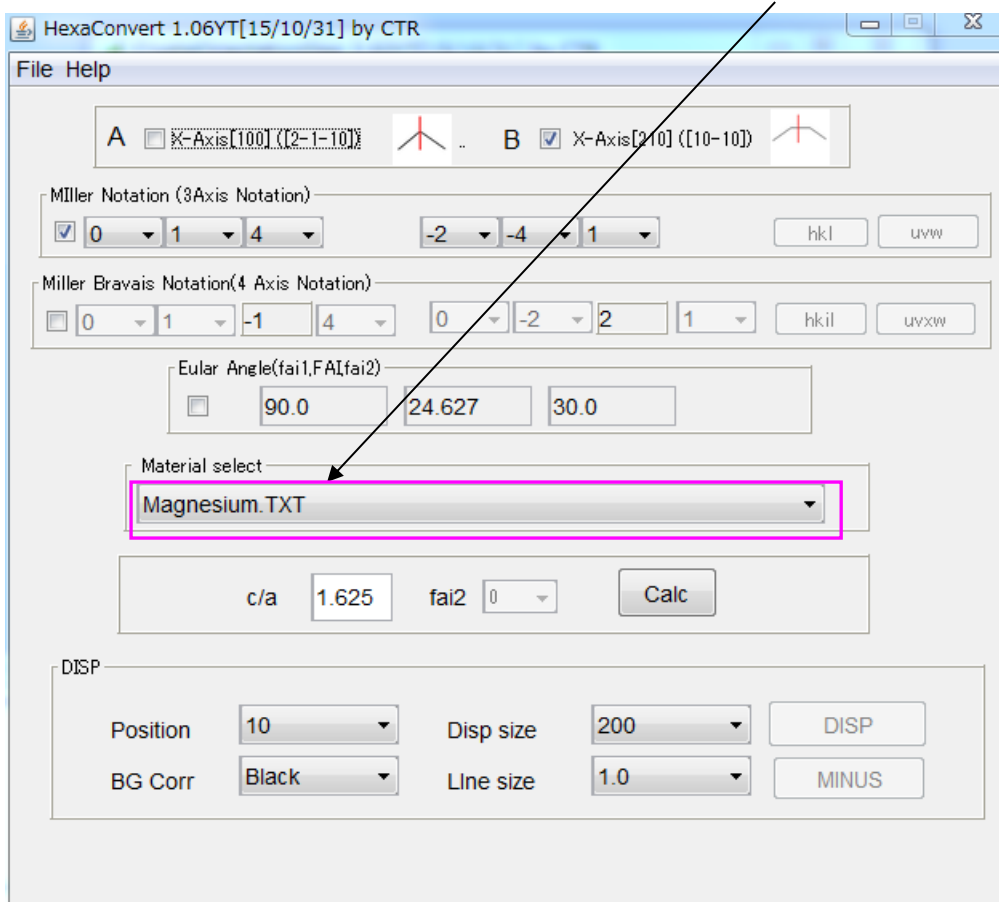


Hexagonal を選択



例えば、HexagonalのMagnesiumを選択すると、

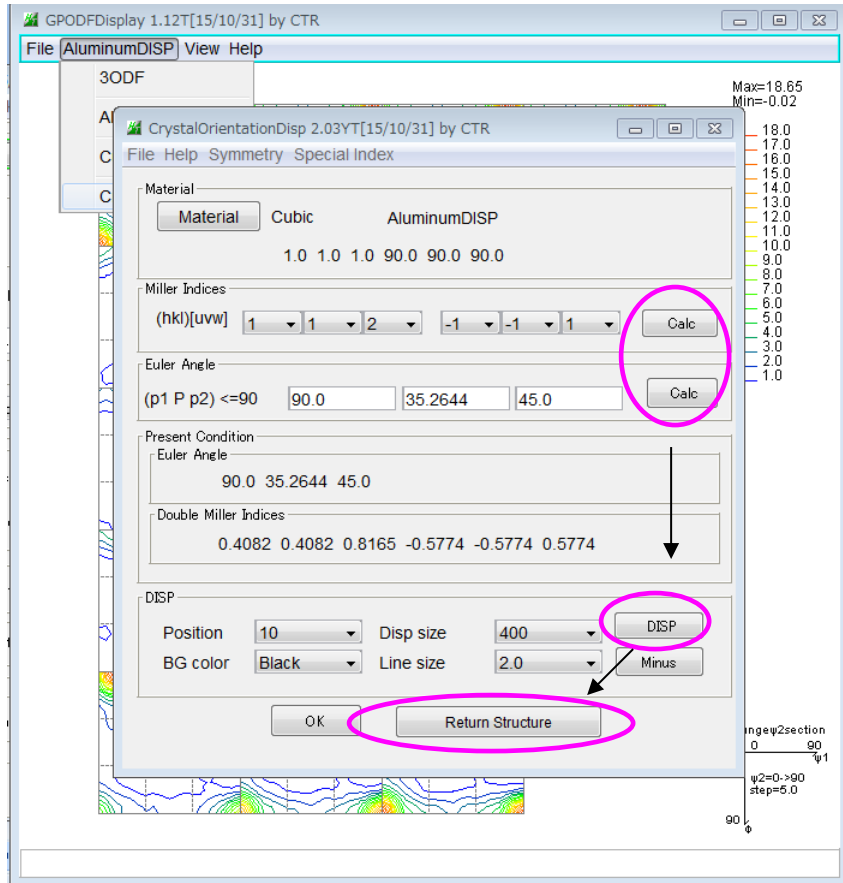
HexaConvertソフトウェアは立ち上がり、Magnesiumが表示される。



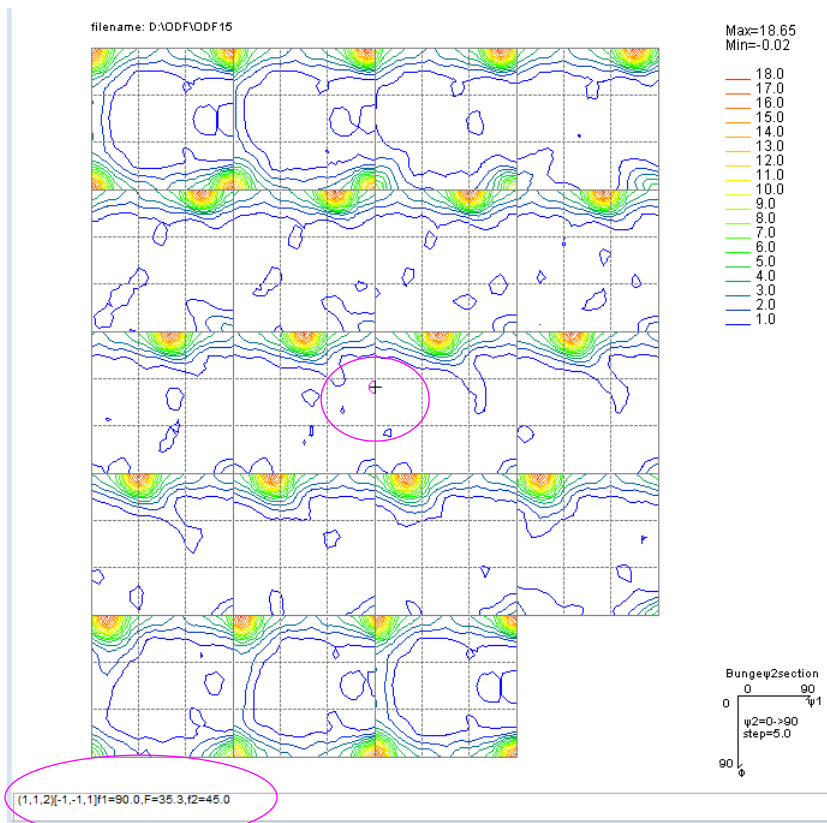
Calcで、Euler角度が表示される。

## 7. GPODFDisplay との連携

GPODFDisplay の CrystalOrientation から起動されると、



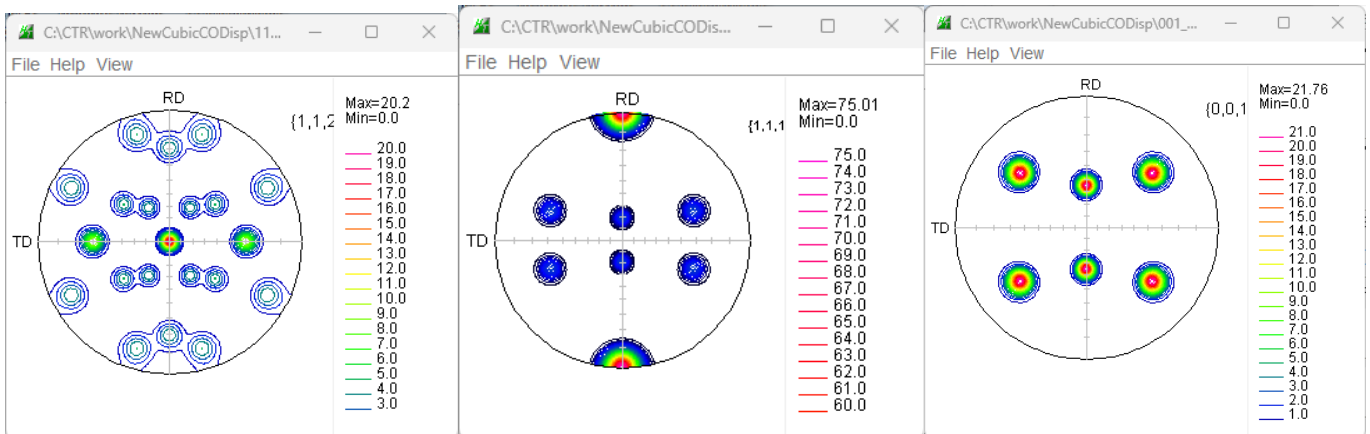
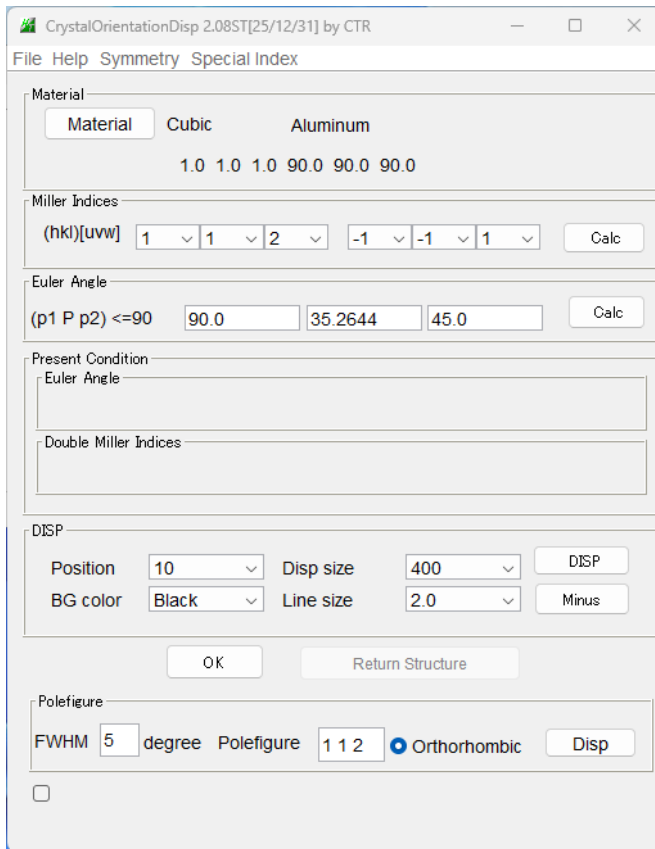
Calc->Disp->Return Structure で  
Position が表示される。



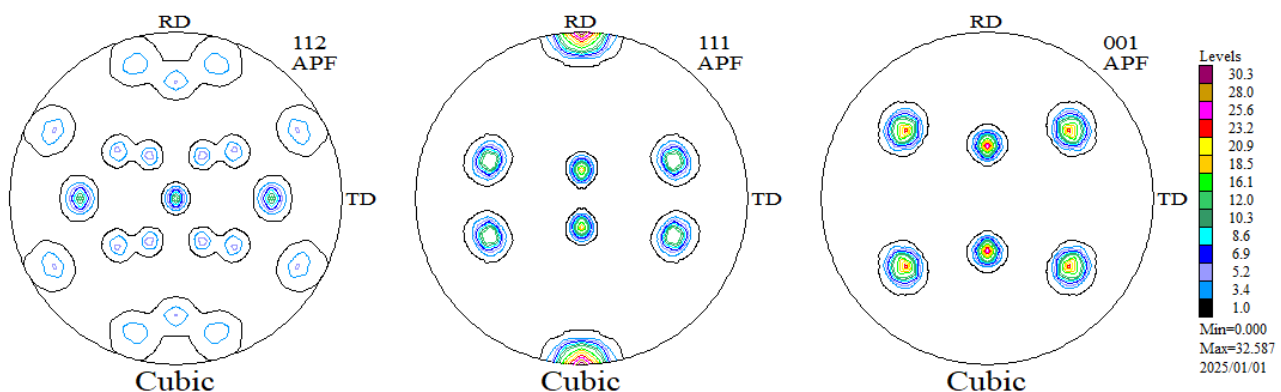
## 8. 極点図の描画

Cubic, Tetragonal, Orthorhombicの描画に関し  
 Cubicは、NewCubicCODispで行い、  
 Tetragonal, Orthorhombicは本ソフトウェアで行う。

### 8.1 Cubic

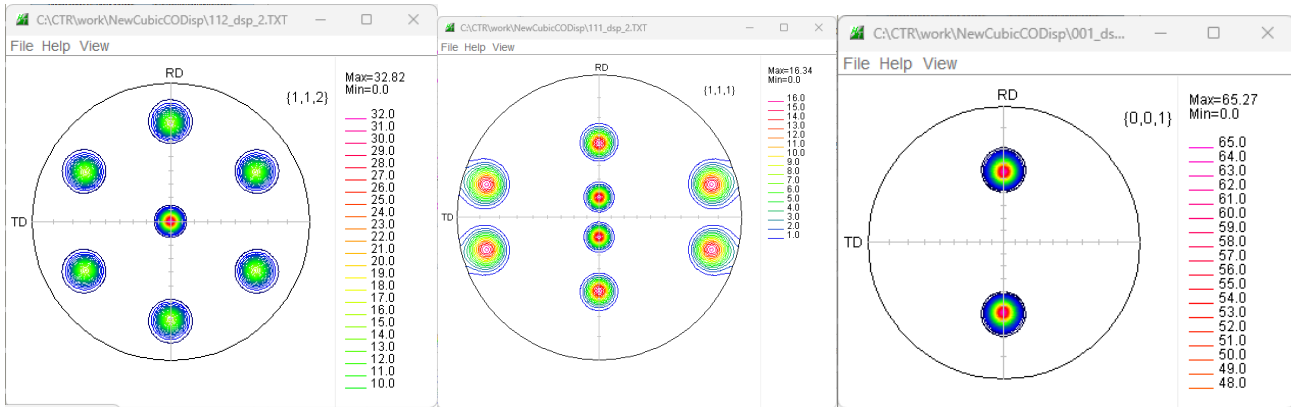
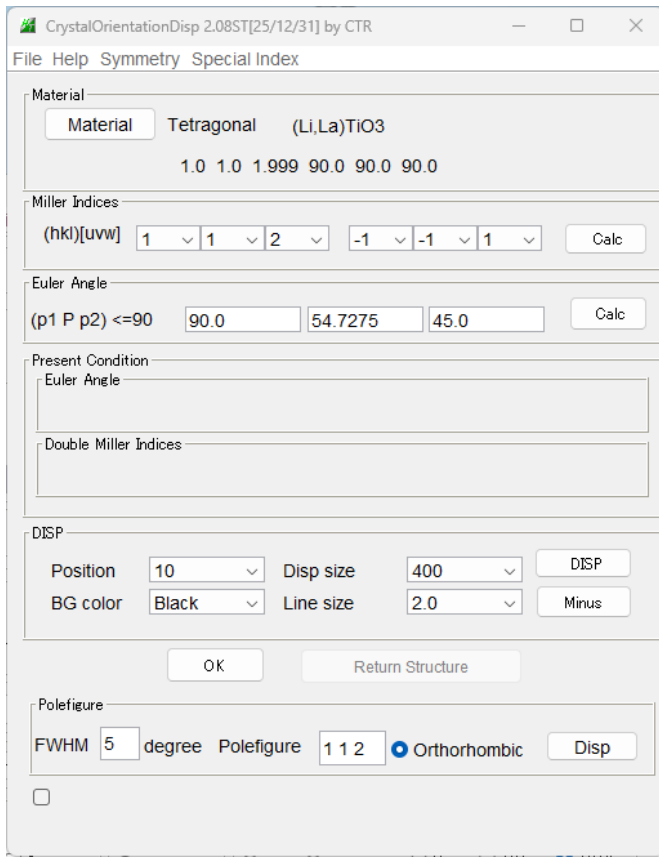


## LaboTex

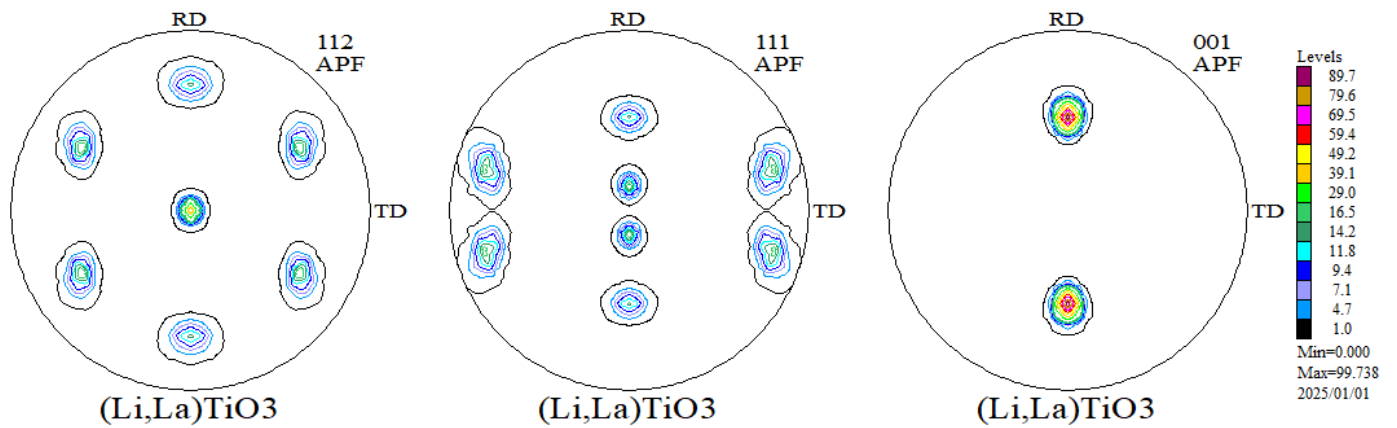


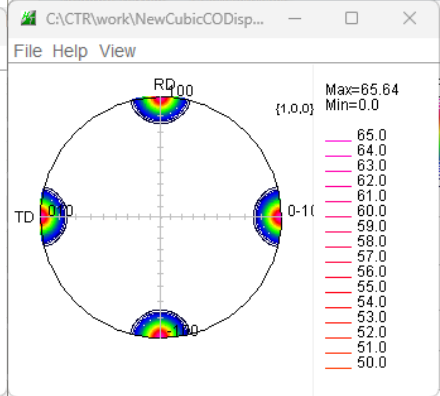
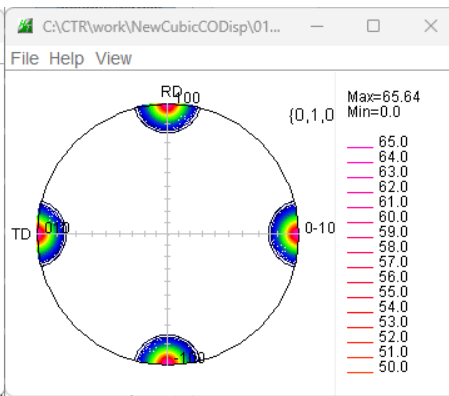
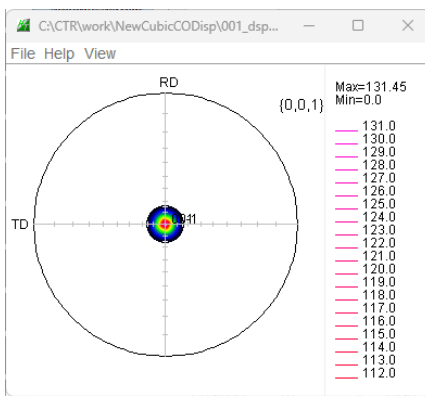
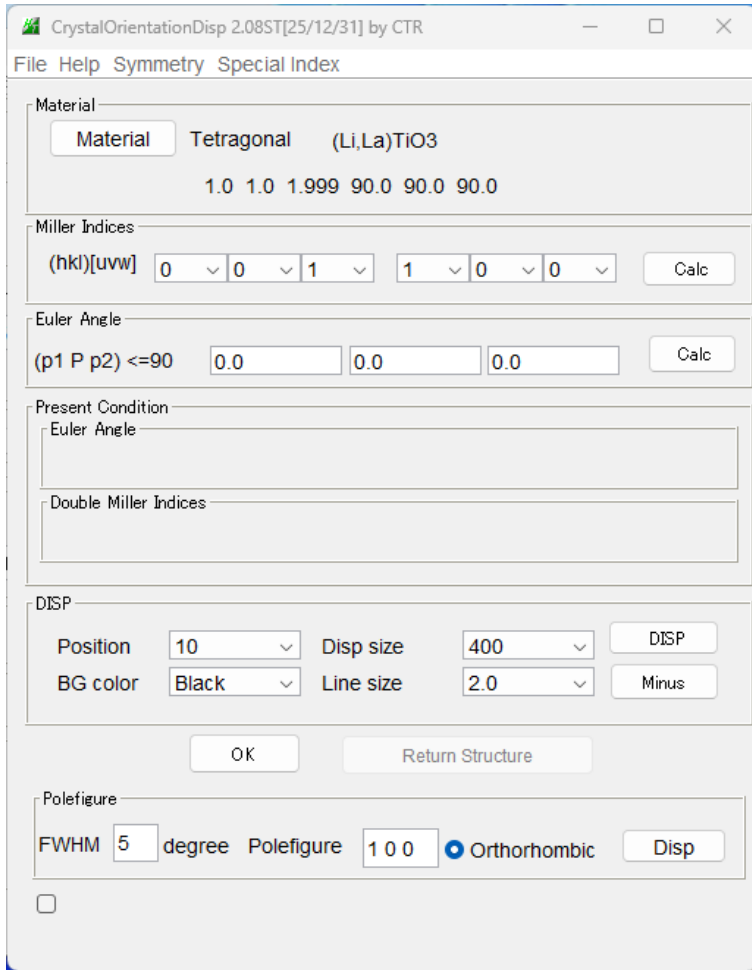


## 8. 2 Tet r a g o n a l

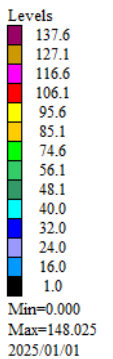
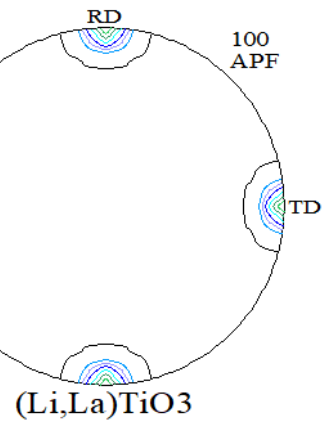
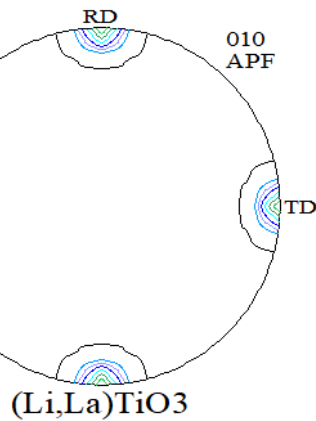
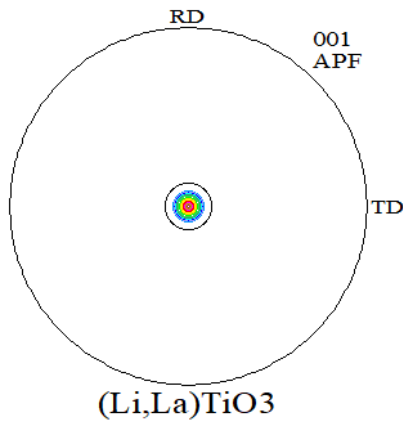


LaboTex

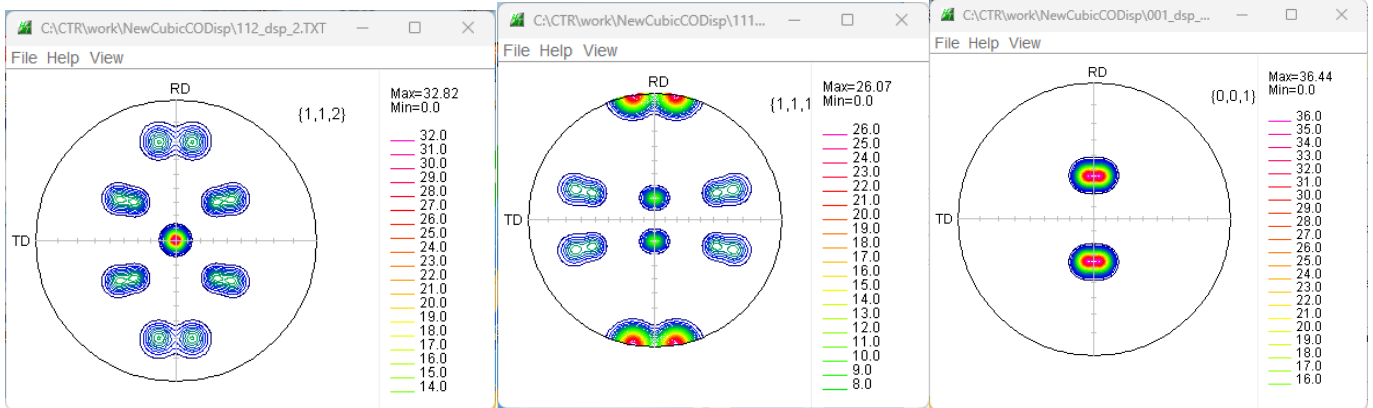
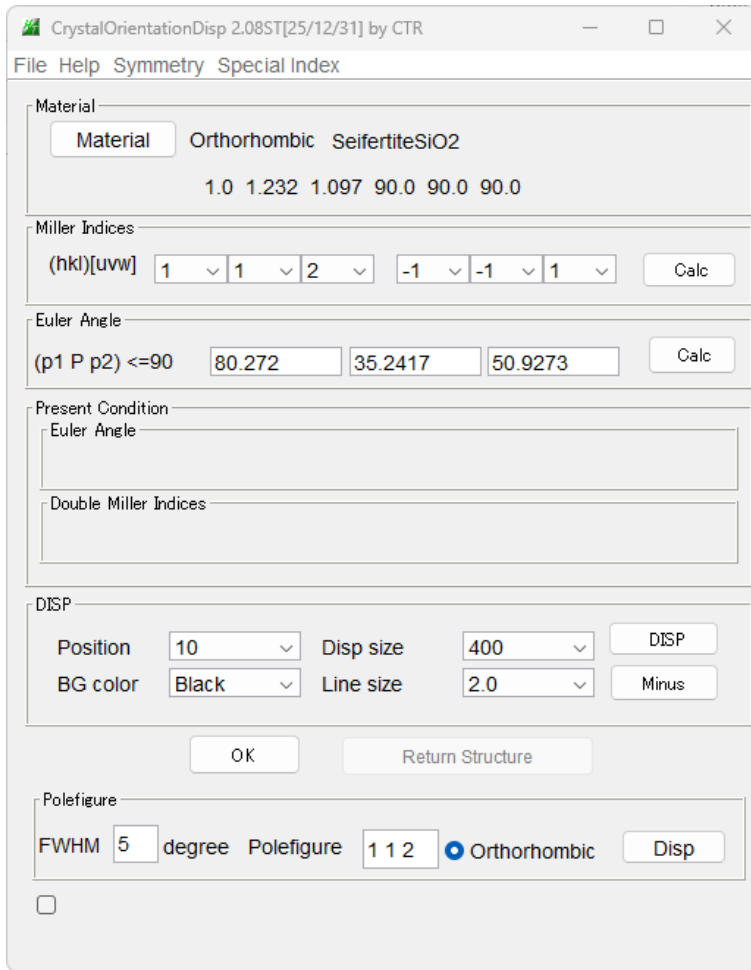




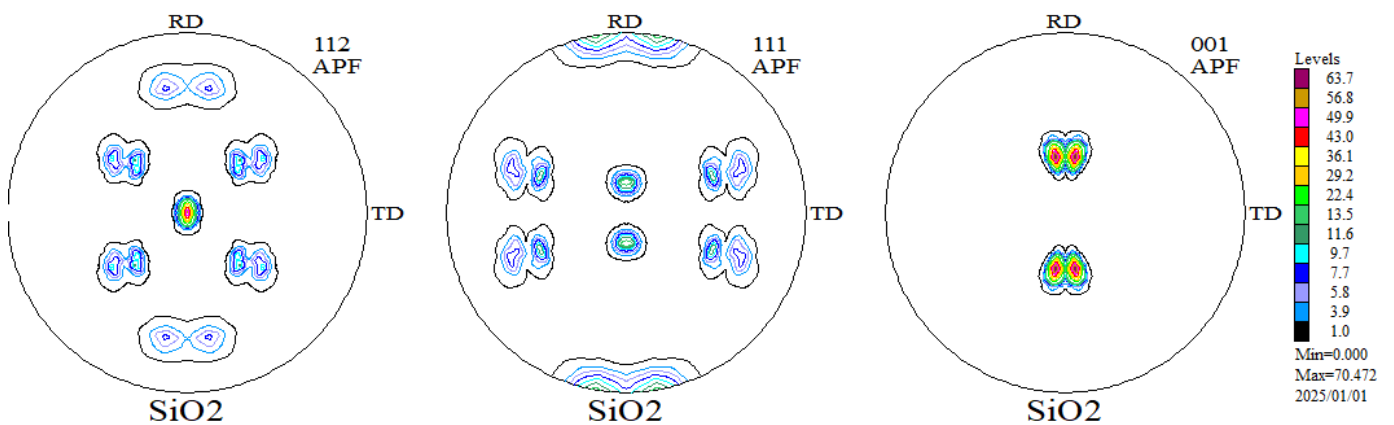
LaboTex

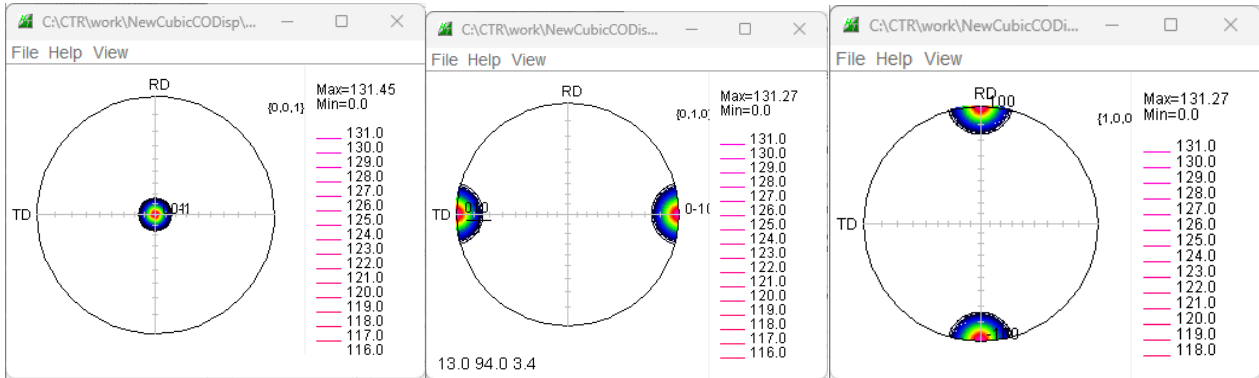
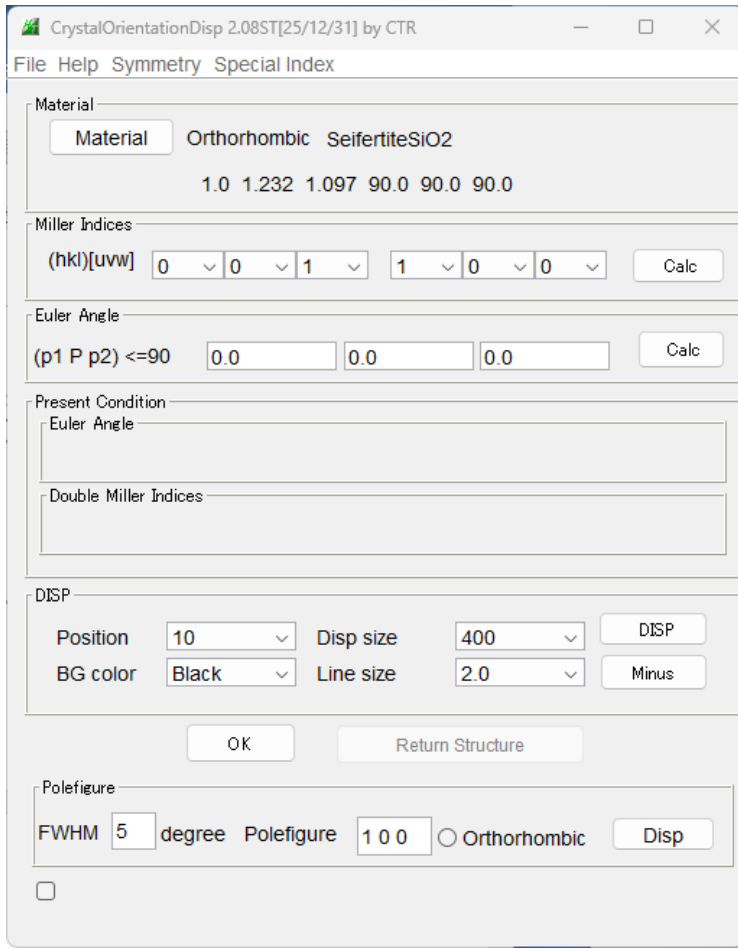


### 8. 3 Orthorhombic

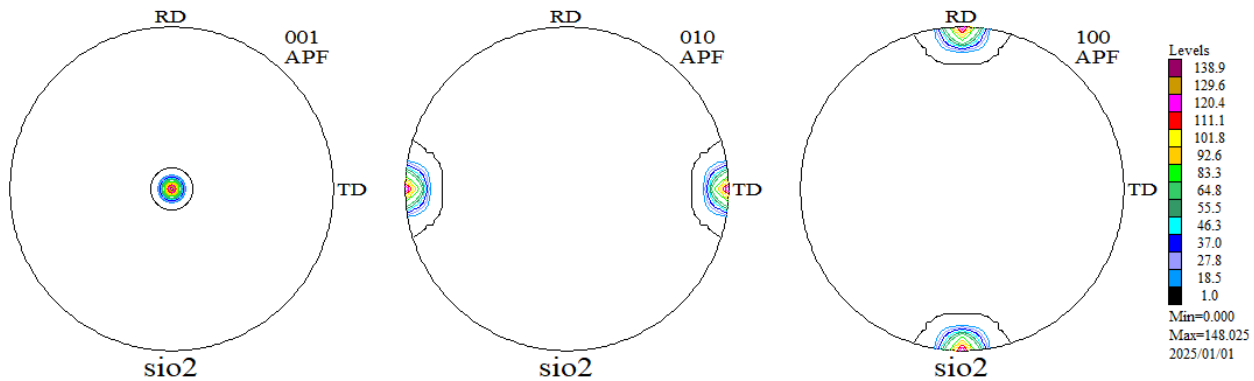


LaboTex





LaboTex



極点図表示に使用したデータは、

CTR¥work¥NewCubicCODispホルダに保存されます。

Calcで削除されます。

## 9. CrystalOrientationDispと連携

回転前の極点図と回転後の極点図比較

The screenshot shows the CrystalRotation 2.01 software interface. The title bar reads "CrystalRotation 2.01 by CTR PDuser CTR CTR". The menu bar includes "File Help RD(TDroate) {uvw}<hkl> (110)[1-12] RV:Integer Orthorhombic".

**Material Section:**  
Material: Cubic  
1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0

**hkl|Kuvw Section:**  
hkl: 1 1 0 | Kuvw: 1 -1 2 → ODF → OrientationDisp

**Rotation vector of crystal axis:**  
 1 -1 -1 SET CTD

**Rotation vector of machine axis(LaboTex,MTEX):**  
 0 1 0 SET

**Rotation angle:**  
90 Calc

**Result Section:**  
1.0 1.0 1.0  
-1.0 -1.0 1.0  
2.0 -1.0 0.0  
RDaxis [1 -1 2]  
TDaxis [1 -1 -1]  
NDaxis [1 1 0]  
1.0 -1.0 -1.0 (1 -1 -1)  
(110)[1-12] eulerangle:(54.738,90.0,45.0)  
Eulerangle  $g(\psi_1 \Phi \psi_2)$ =  
0.4082 0.5774 0.7071  
-0.4082 -0.5774 0.7071  
0.8165 -0.5774 0.0  
Rotation [1,-1,-1] angle:90.0  
Calc-d=(0.5774,-0.5774,-0.5774)  
a(1.0,-1.0,-1.0),90.0  
Rotated Eulerangle  
0.3333 -0.9107 0.244  
0.244 0.3333 0.9107  
-0.9107 -0.244 0.3333  
Rotated RD TD ND  
0.7071 0.5774 -0.4082  
0.7071 -0.5774 0.4082  
0.0 -0.5774 -0.8165  
Calc Miller indices \*\*\*\*\* NewCalc \*\*\*\*\*  
(-1.0 1.0 -2.0)[1.0 1.0 0.0]  
(1 1 2)[-1 1 0] (180.0 35.26 45.0)  
INT/DOUBLE= (1.0 1.0 1.0)[1.0 1.0 0.0]

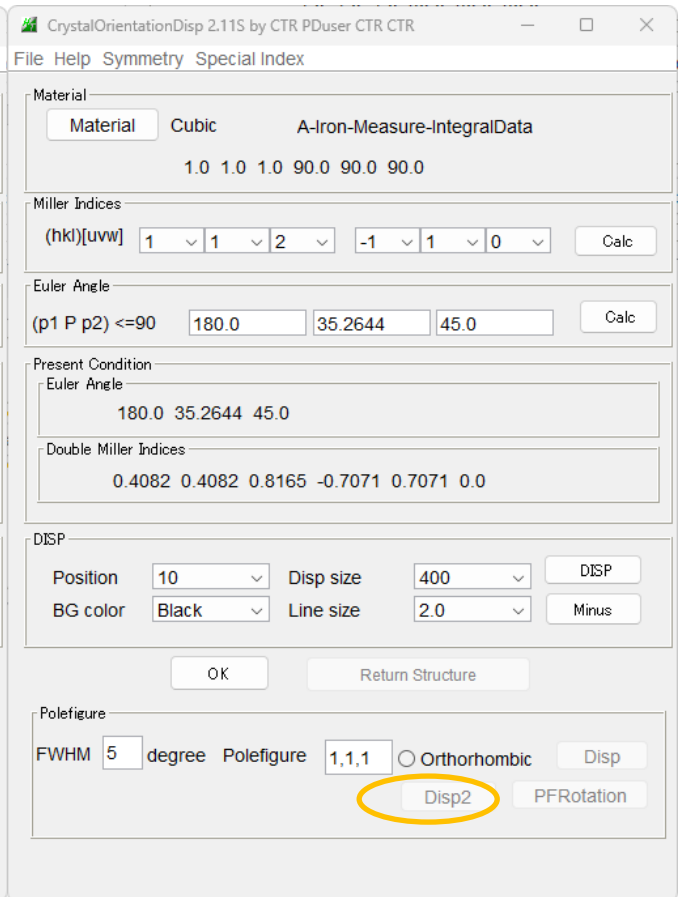
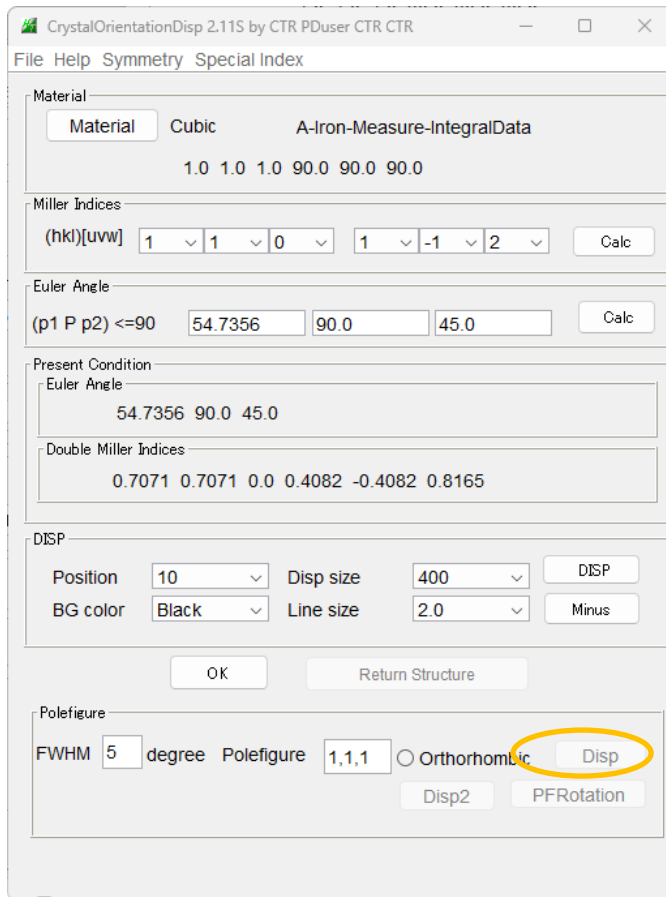
**Bottom Section:**  
(1 1 2)[-1 1 0] → ODF set|hkl|Kuvw → OrientationDisp ResultClear

**Footer:**  
Result (-11-2)[110] toOrthorhombic (112)[-110] (180.0 35.26 45.0)

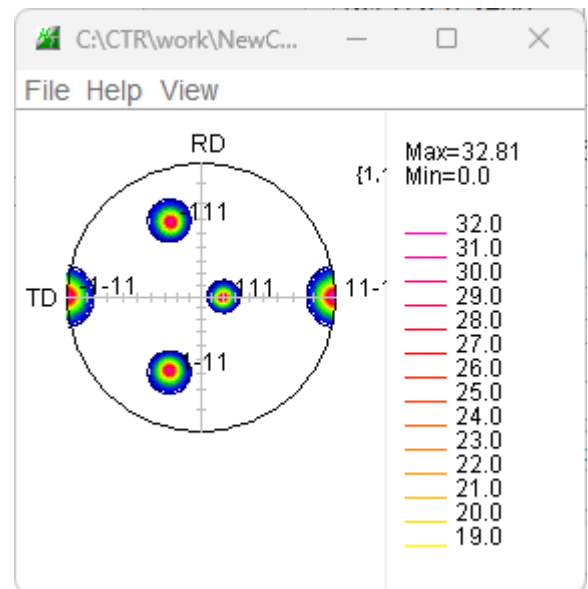
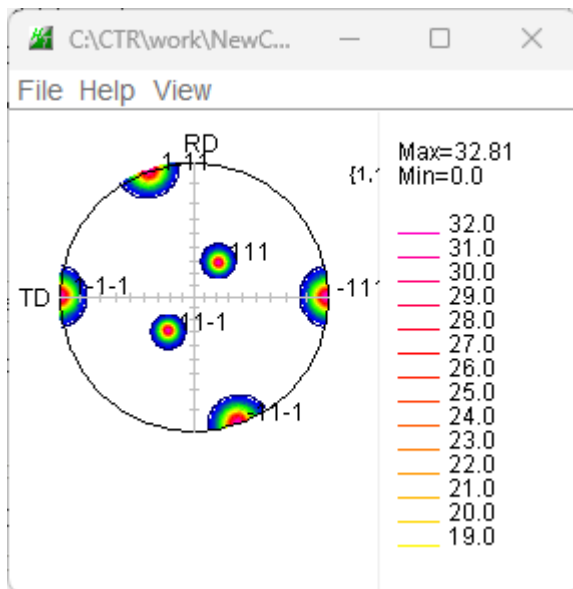
## 9. 1 CrystalOrientationDispで確認

回転前

回転後



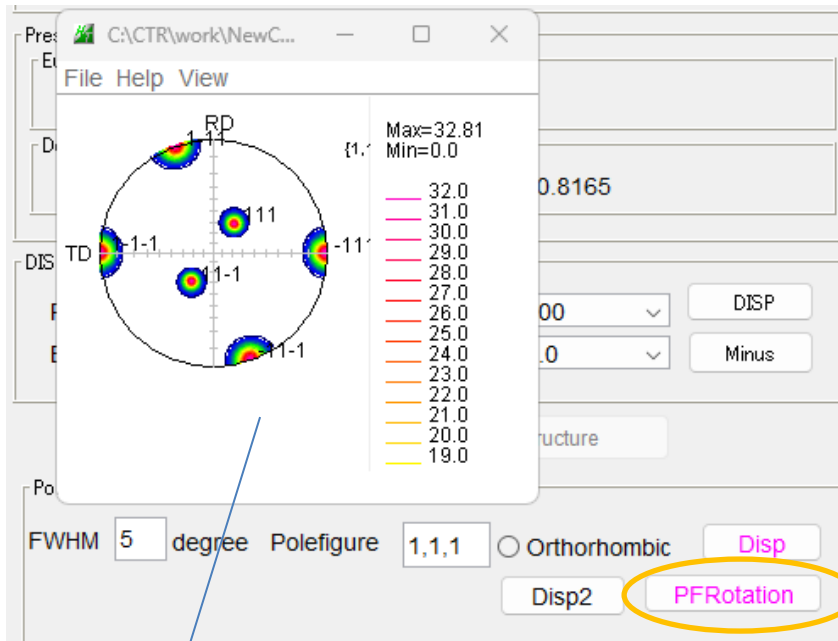
Calc後Disp (回転前) とDisp2 (回転後)



PoleFigureContourDisplay で表示しているため、Disp と Disp2 で表示切替

## 9.2 PFRotationで確認

回転前の極点図をPFRotationに渡す



TD 軸 90 度回転

