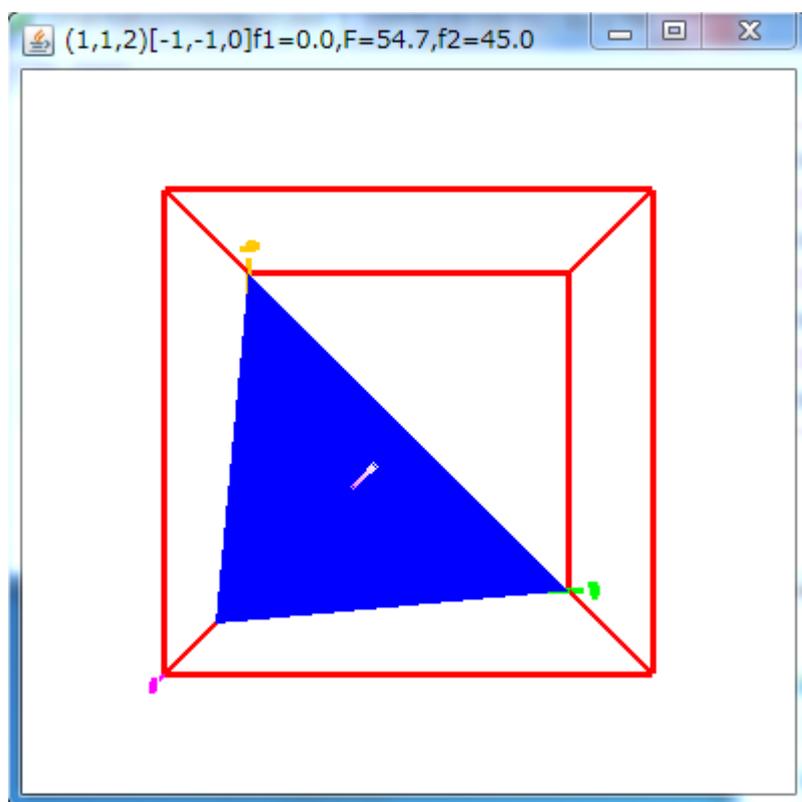


結晶方位表示のための

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, Orthorhombic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。

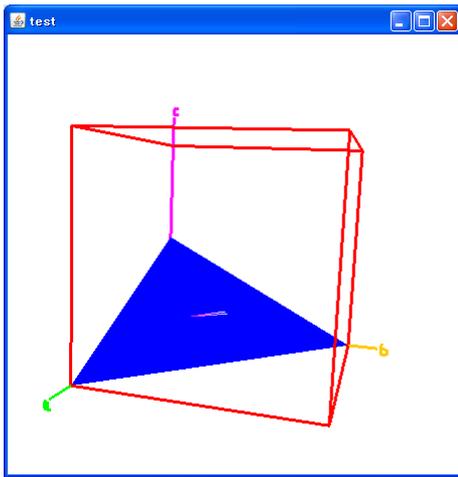
入力部分と、表示部分を別ソフトウェアで作成しているが、表示機能も取り込んだ。

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 (ϕ_1, Φ, ϕ_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} <uvw> \rightarrow (ϕ_1, Φ, ϕ_2)

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

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

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

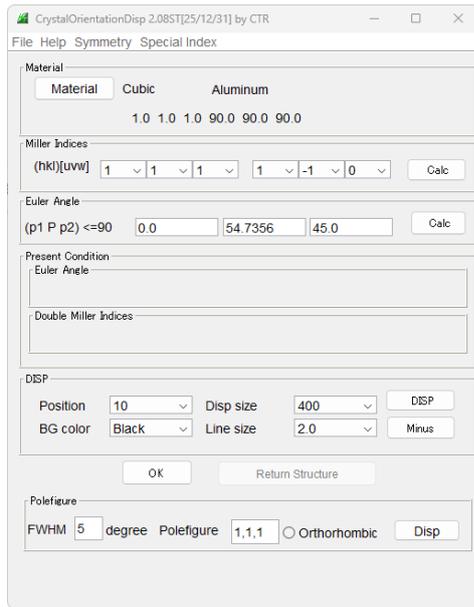
$$\sin \phi_1 = W / X * Y$$

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

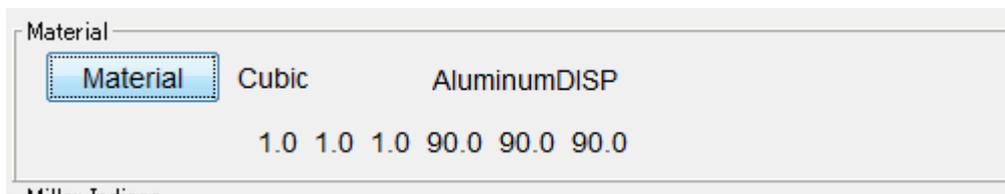
$$Y = \sqrt{(H^2 + K^2 + L^2) / (H^2 + K^2)}$$

3. ソフトウェアの使い方

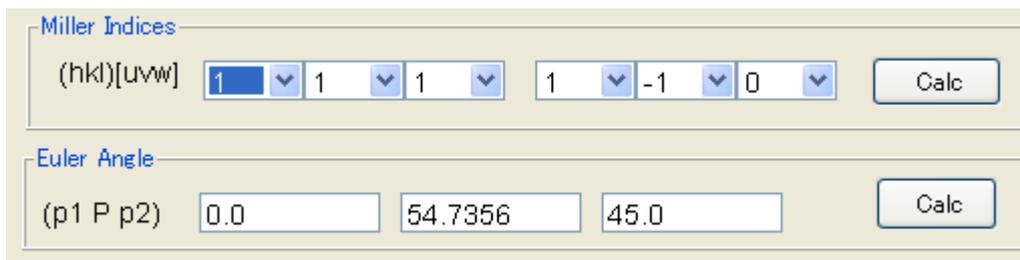
ODFPoleFigure2->TooKit->OrientationDisplay-CrystalOrientationDisp
C:\¥CTR¥bin¥NewCrystalOrientationDisp.jar



結晶系の指定

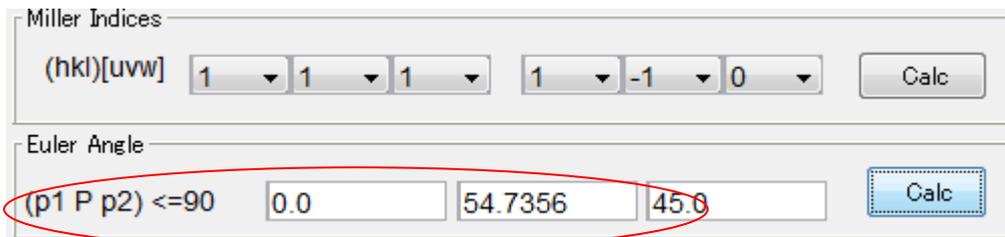


(hkl)[uvw] 或いは Euler 角度を入力する。



例えば

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

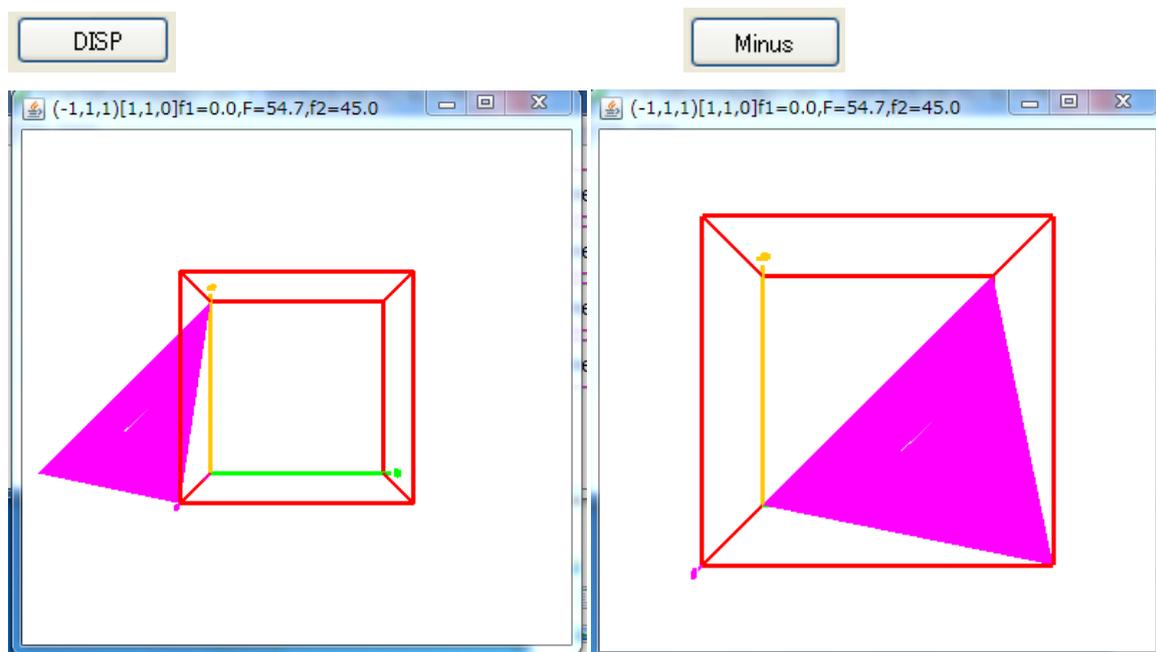


Euler 角度が表示される。DISP の DISP で結晶方位図が表示される。



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 0.0 45.0 0.0 Calc

Euler 角度の横の Calc で計算

Miller Indices
(hkl)[uvw] 0 1 1 1 0 0 Calc

Euler Angle
(p1 P p2) <=90 0.0 45.0 0.0 Calc

Present Condition
Euler Angle
0.0 43.0 0.0

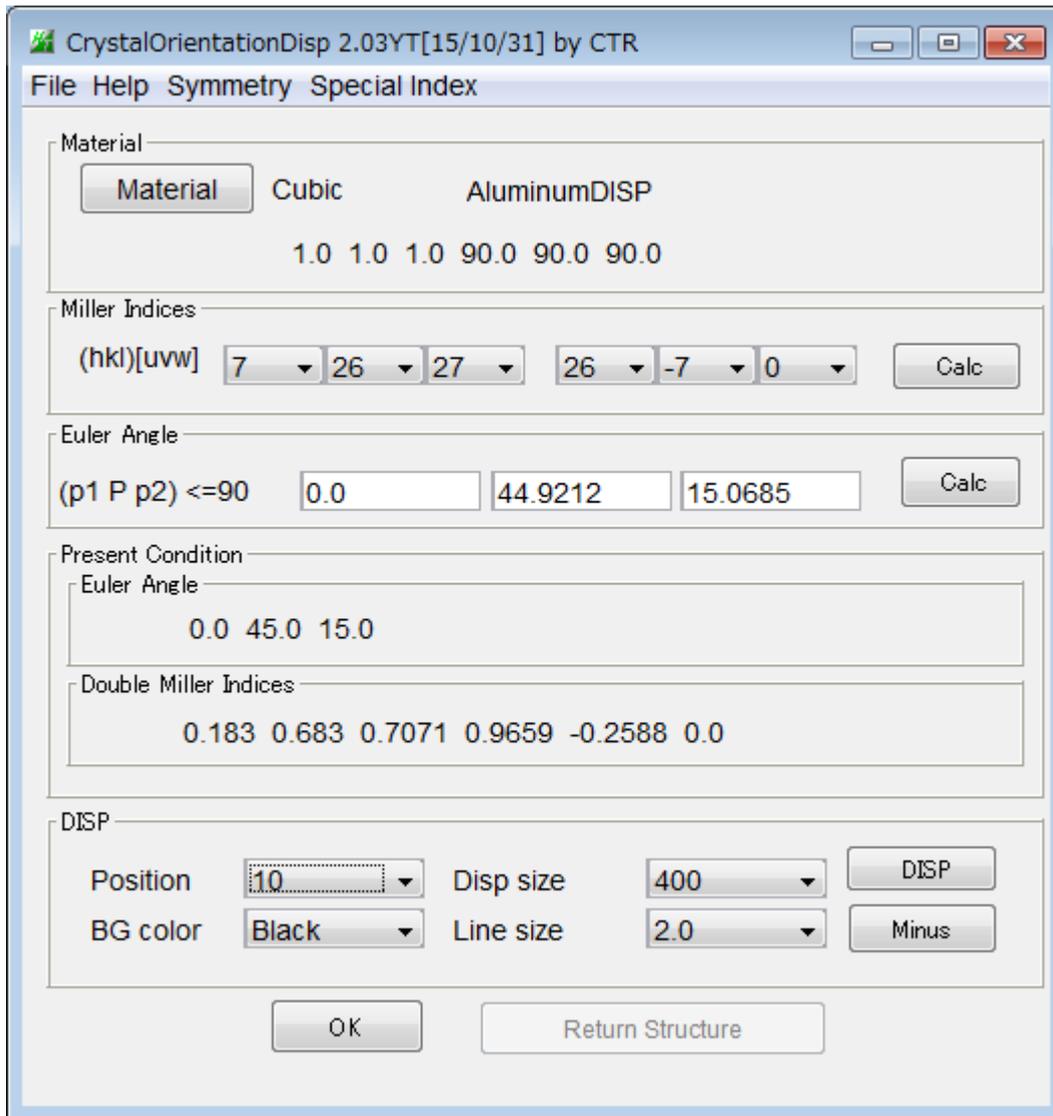
Double Miller Indices
0.0 0.682 0.7314 1.0 0.0 0.0

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

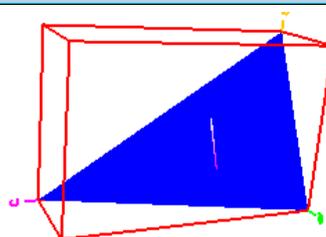
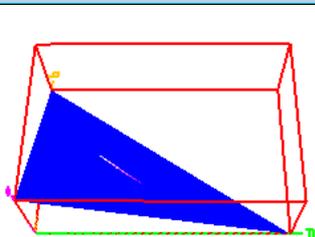
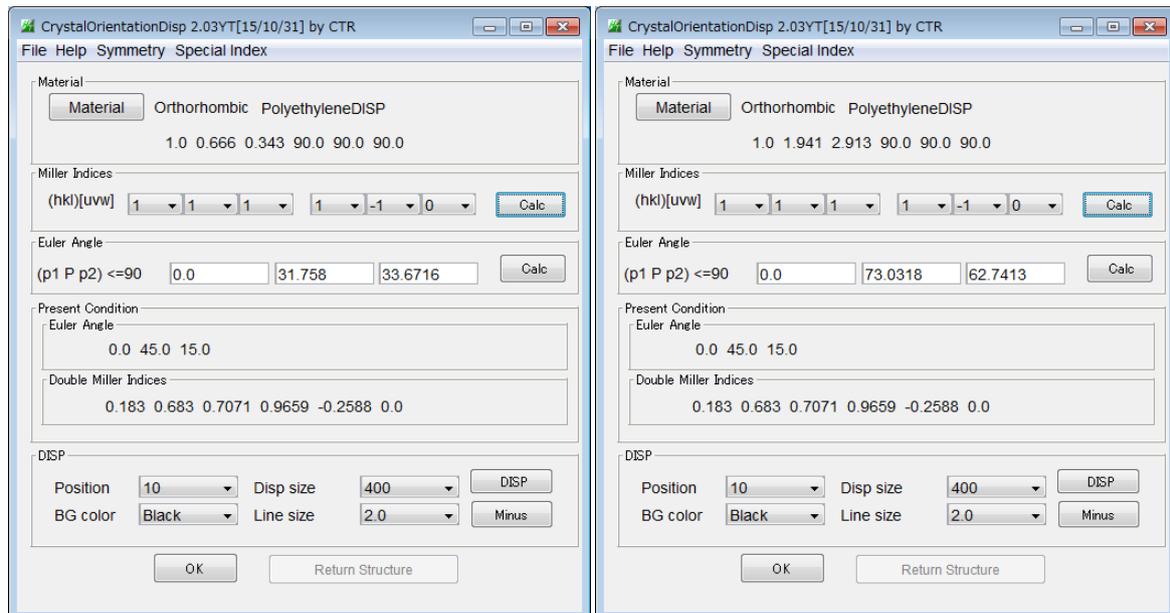
PolyethyleneはOrthorhombicであり、格子定数は

```
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
```

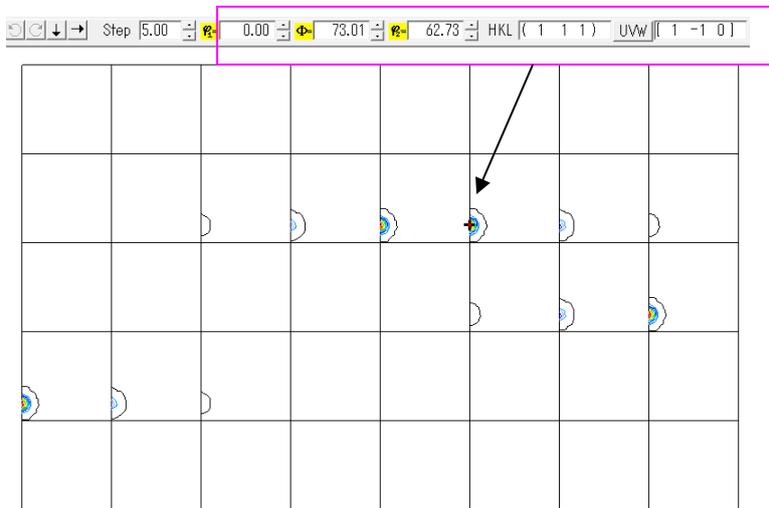
しかし、LaboTexの場合、Z軸に最長の軸を合わせる為、

```
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
```

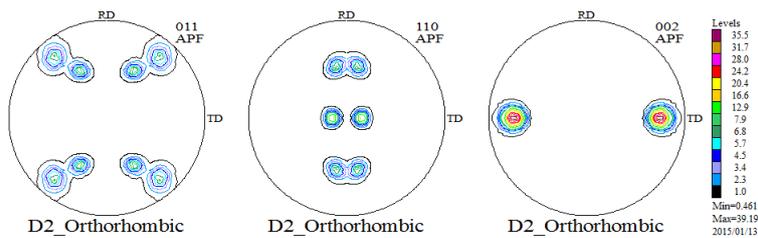
と表現されます。同じ(111)[1-10]でも Euler 角度は異なります。



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)

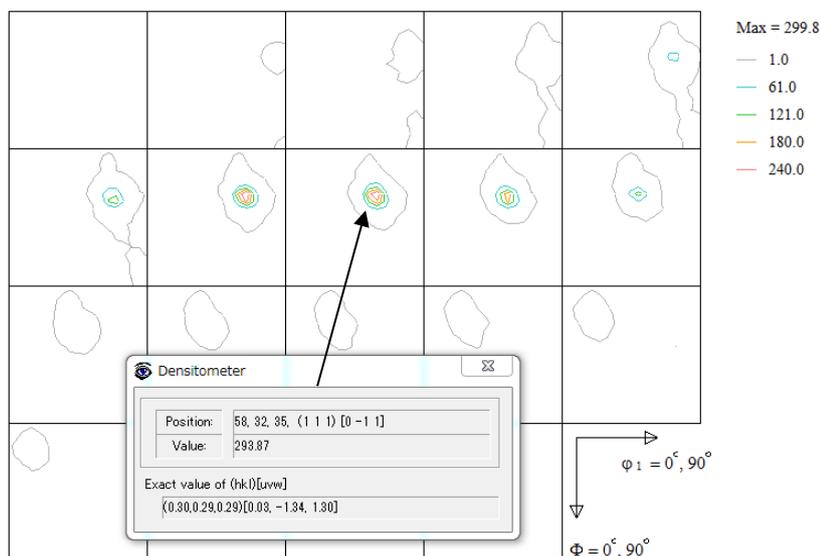
Material: Polyethylene.txt

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

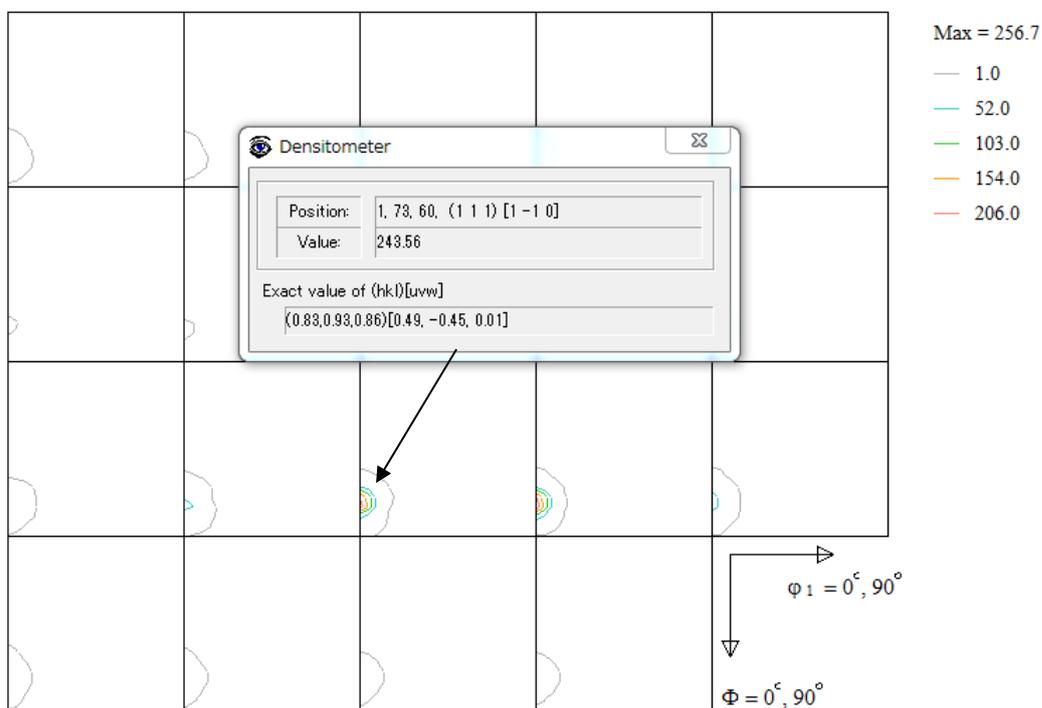
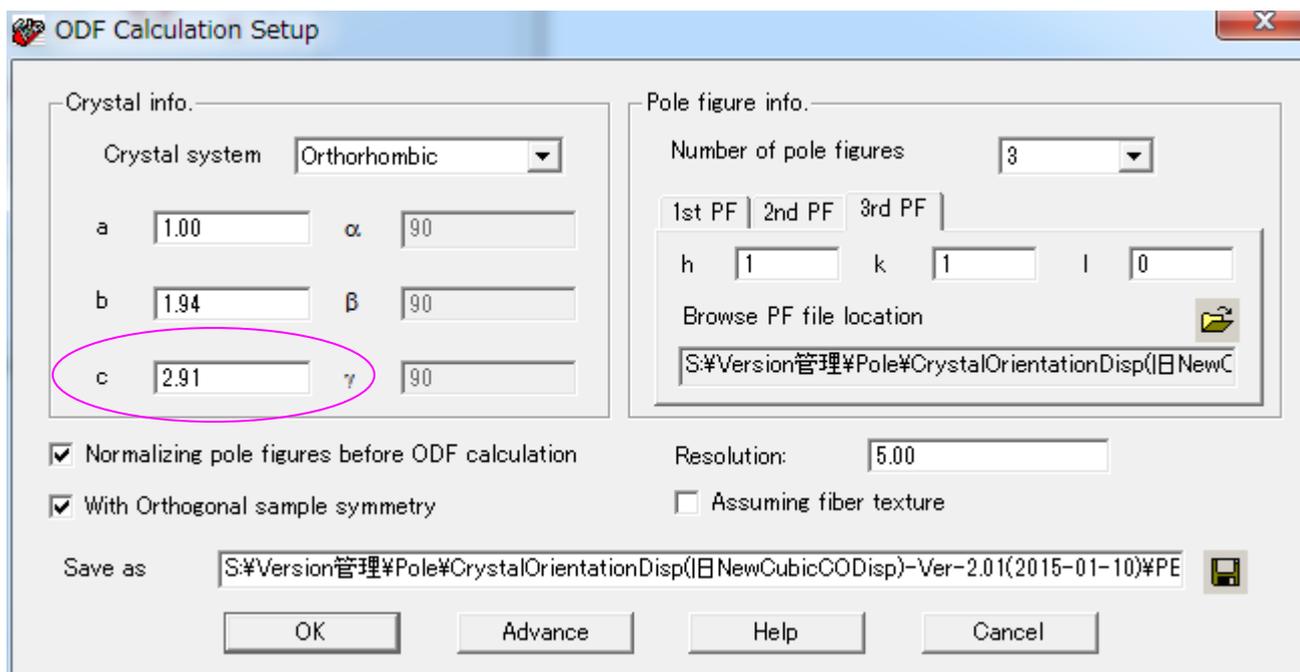
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
002_labotex-rp_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
011_labotex-rp_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
110_labotex-rp_2.TXT	0,1,1	0.0	0.0->90.0	0.0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

Labotexの(111)[1-10]をTextToolsで読み込み



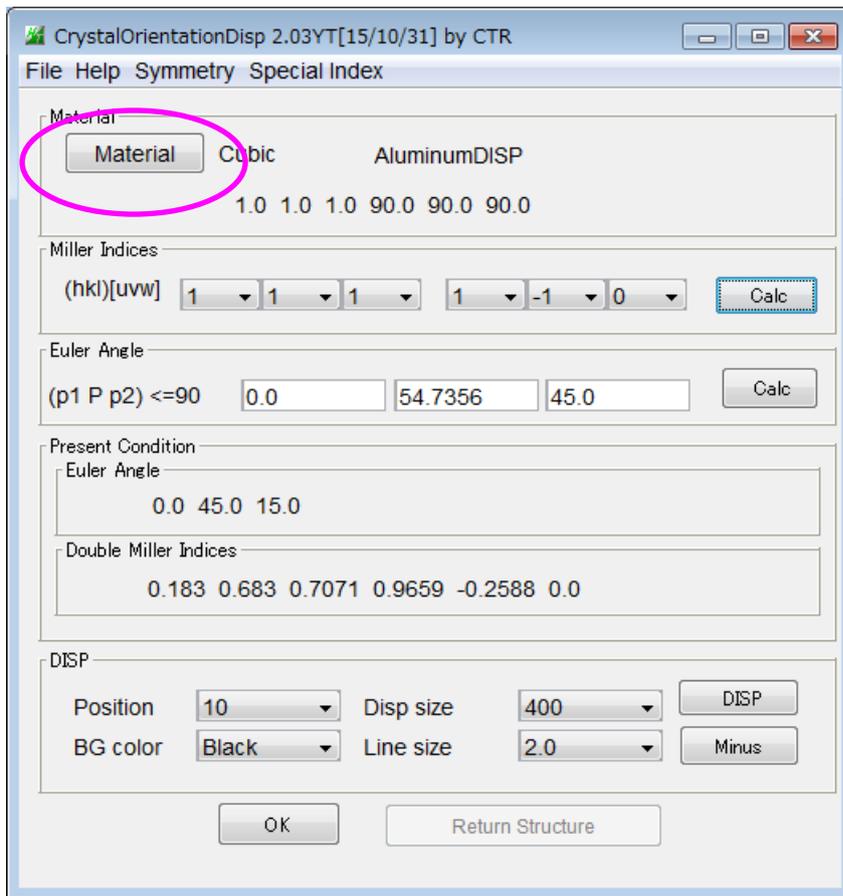
(111)[0-11]として計算される。

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

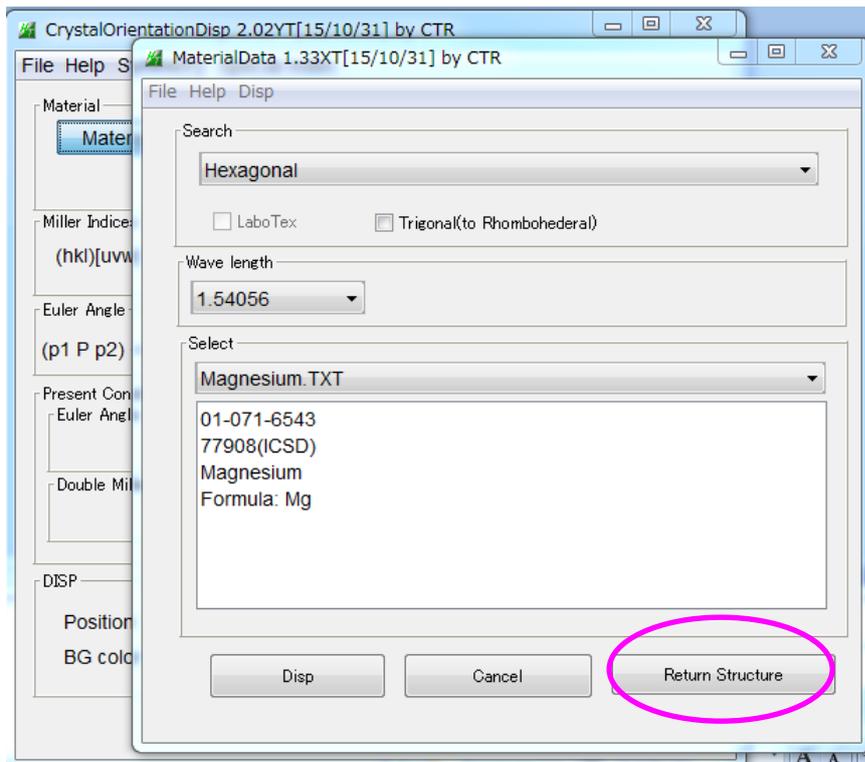


L a b o T e x と同様に、(111)[1-10]として計算される。

6. Hexagonal

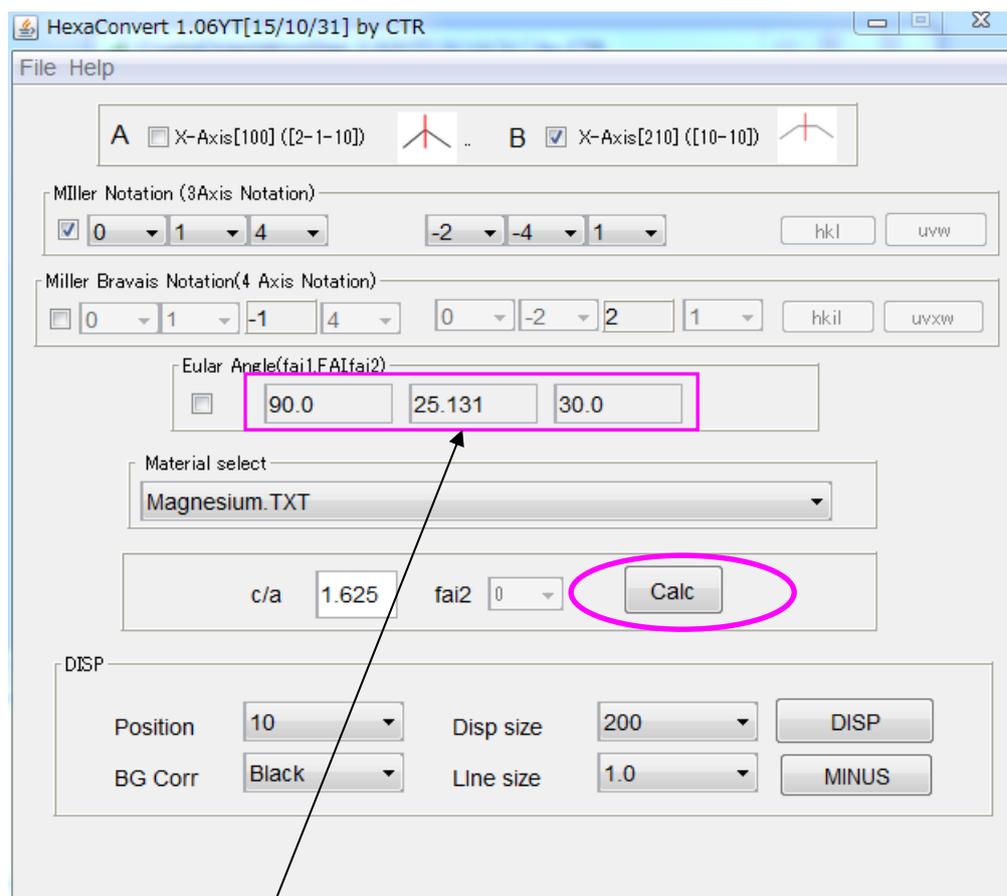
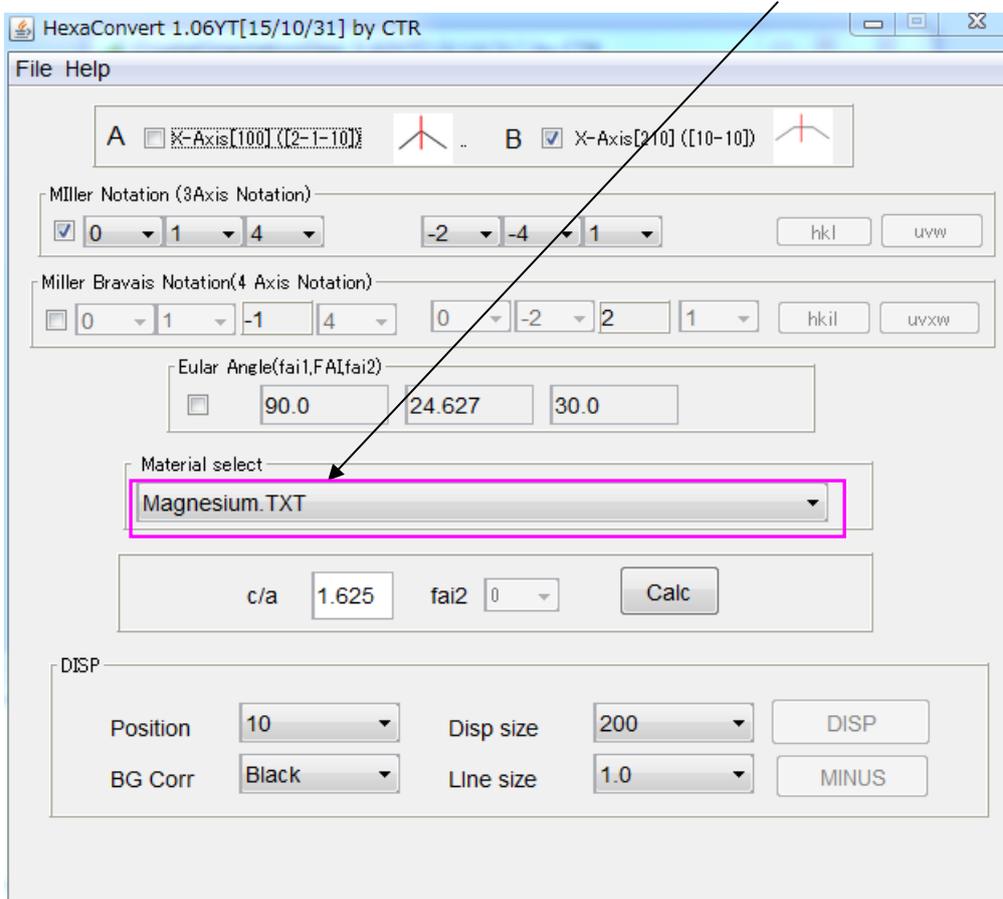


Hexagonal を選択



例えば、HexagonalのMagnesiumを選択すると、

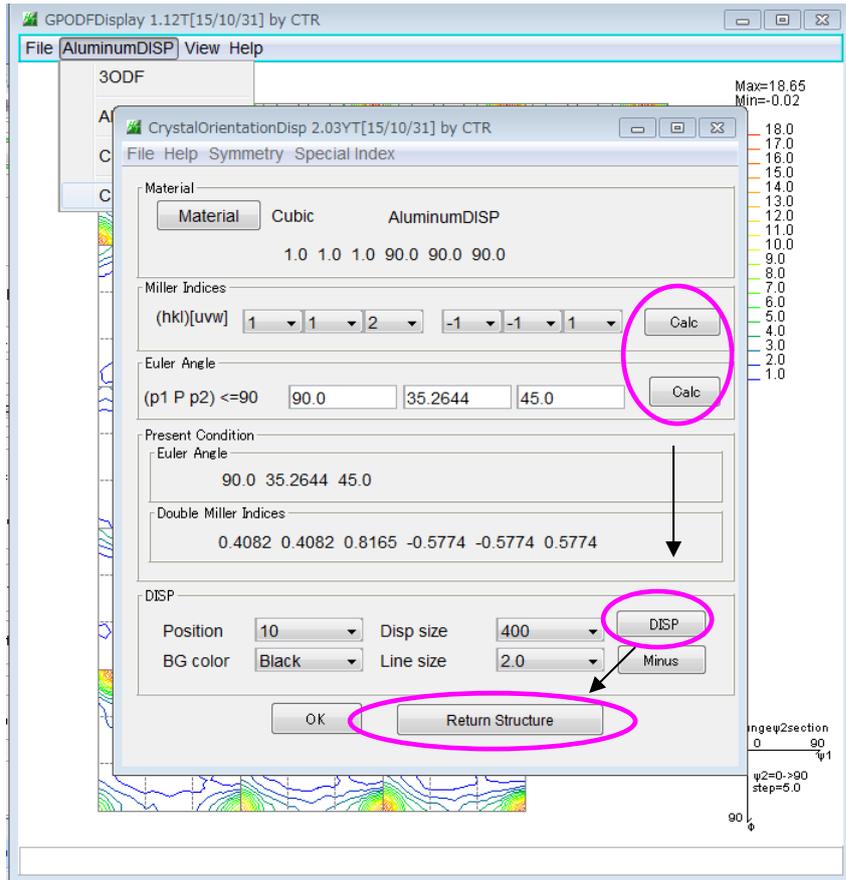
HexaConvertソフトウェアは立ち上がり、Magnesiumが表示される。



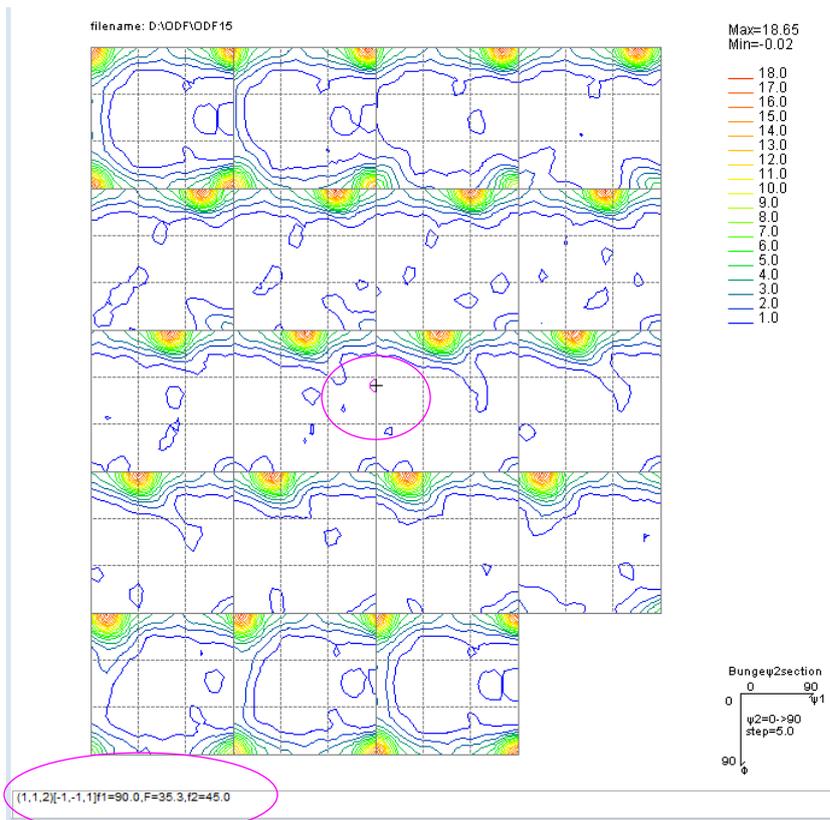
Calcで、Euler角度が表示される。

7. GPODFDisplay との連携

GPODFDisplay の CrystalOrientation から起動されると、



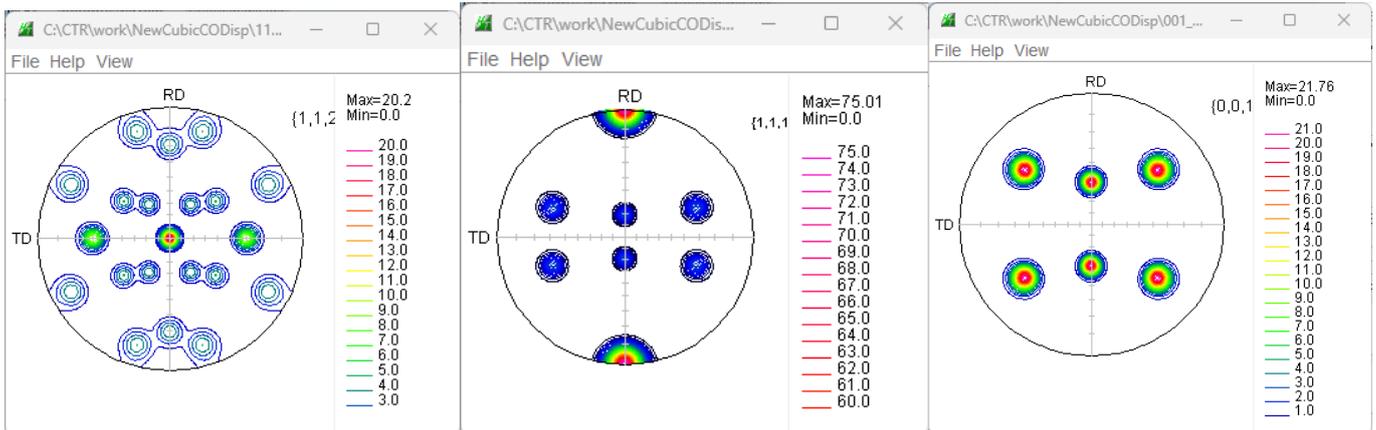
Calc->Disp->Return Structure で
Position が表示される。



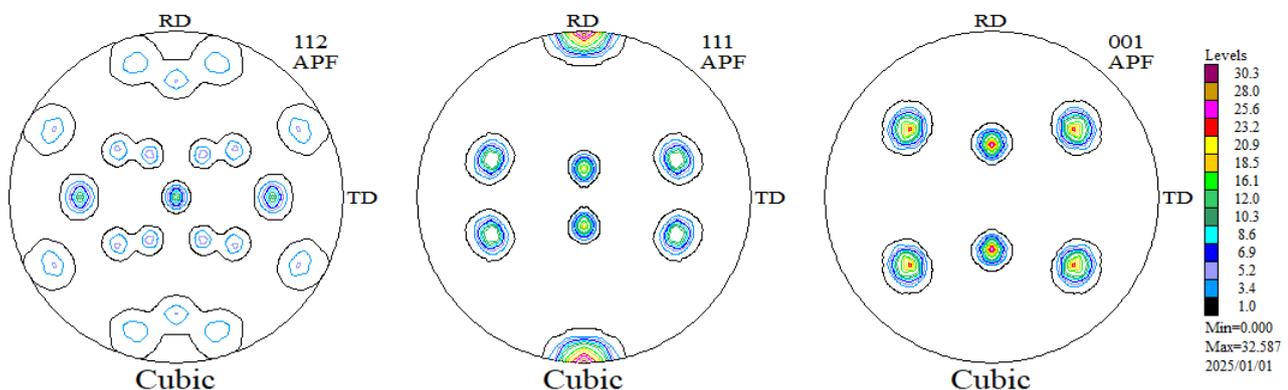
8. 極点図の描画

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。

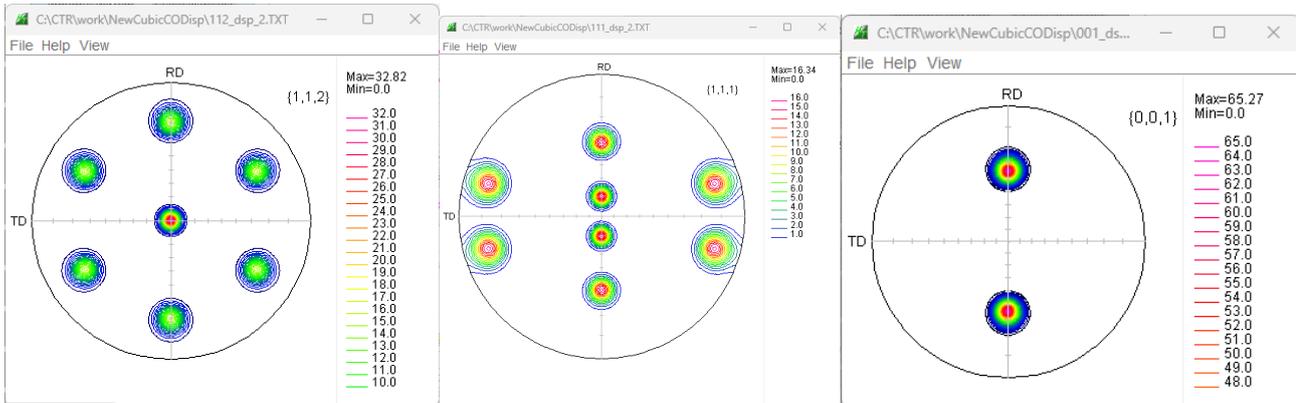
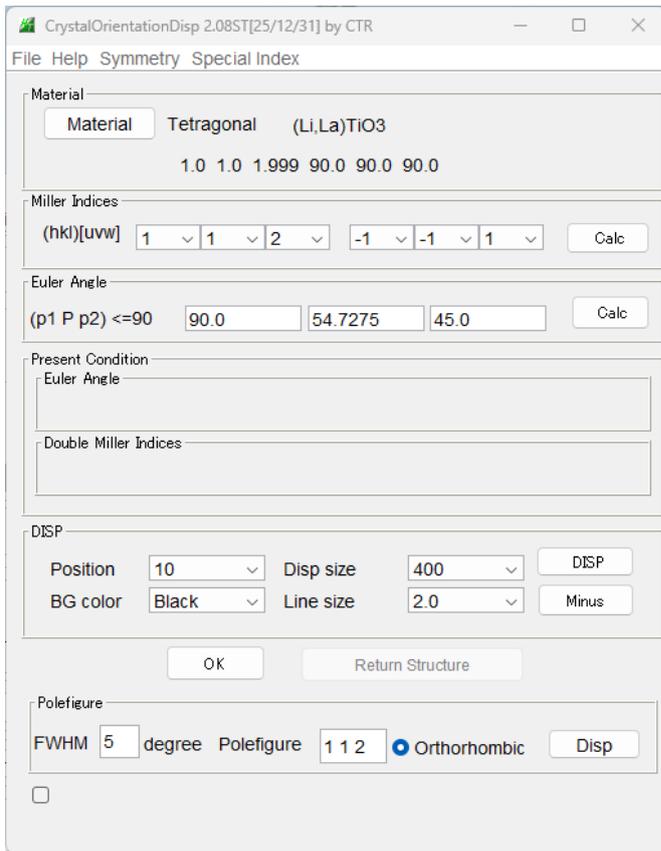
8.1 Cubic



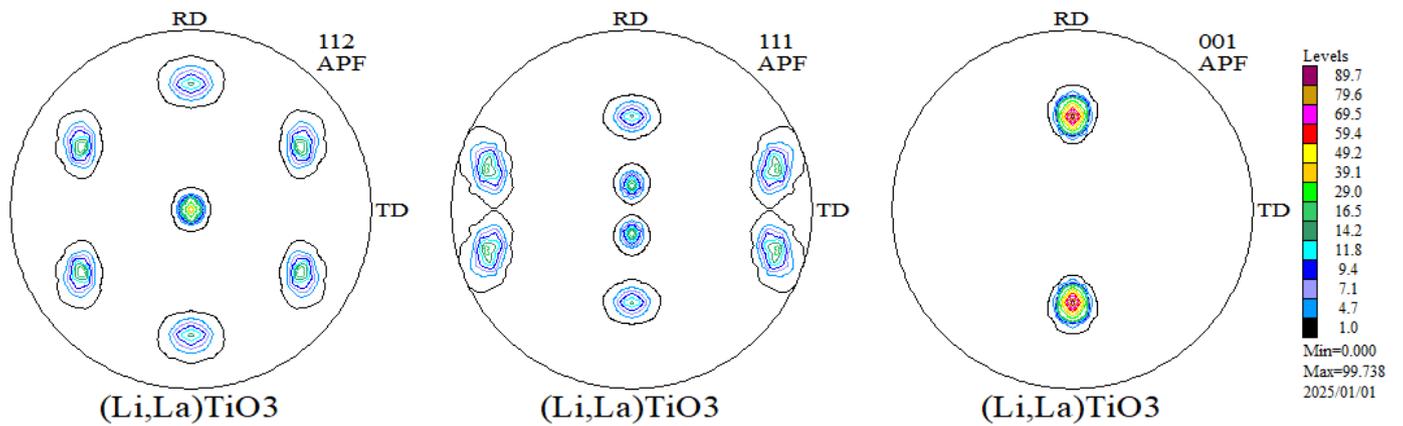
LaboTex

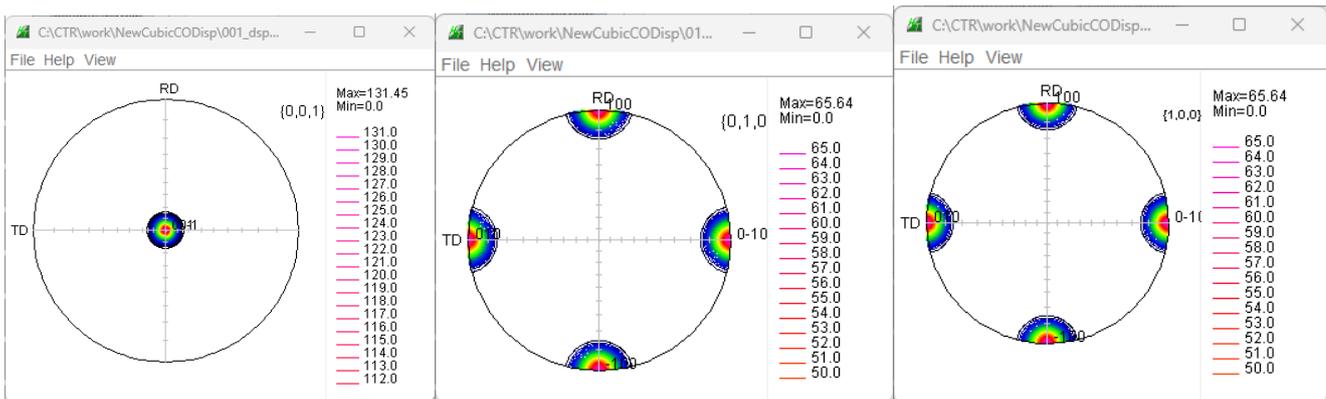
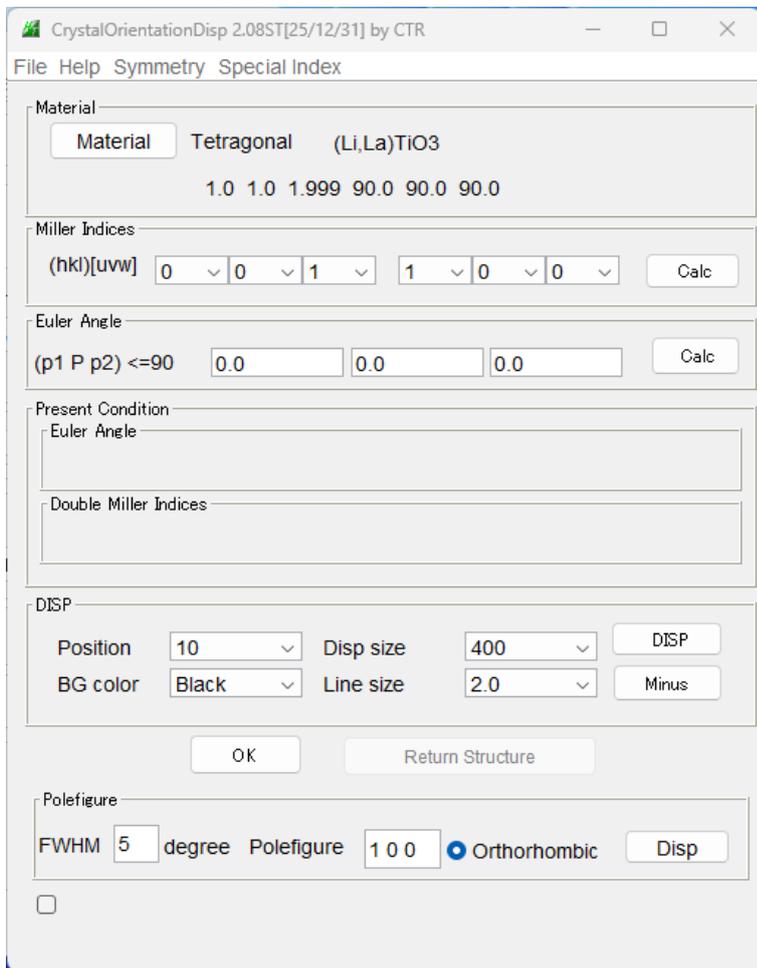


8. 2 Tet r a g o n a l

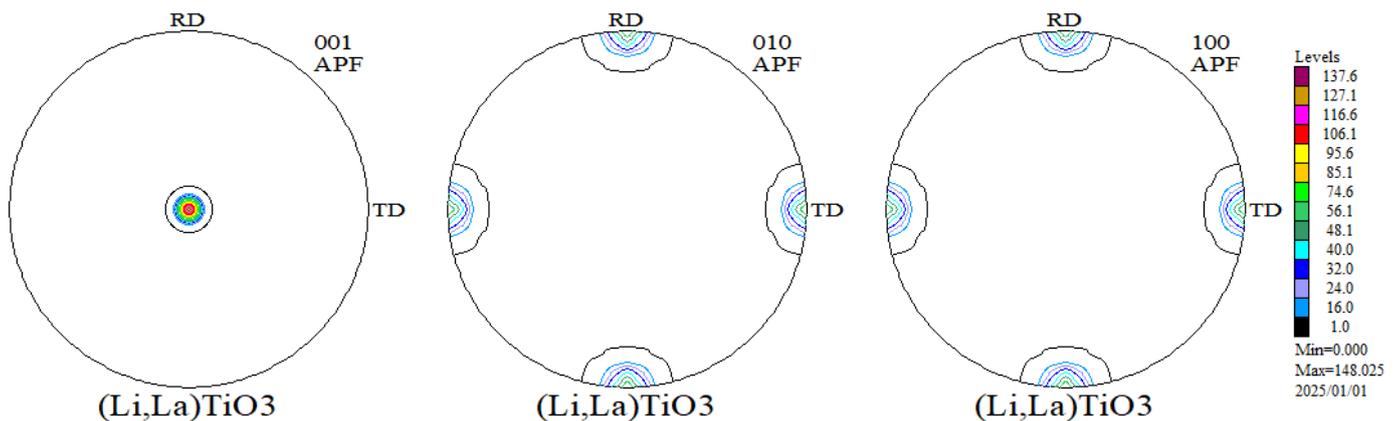


LaboTex

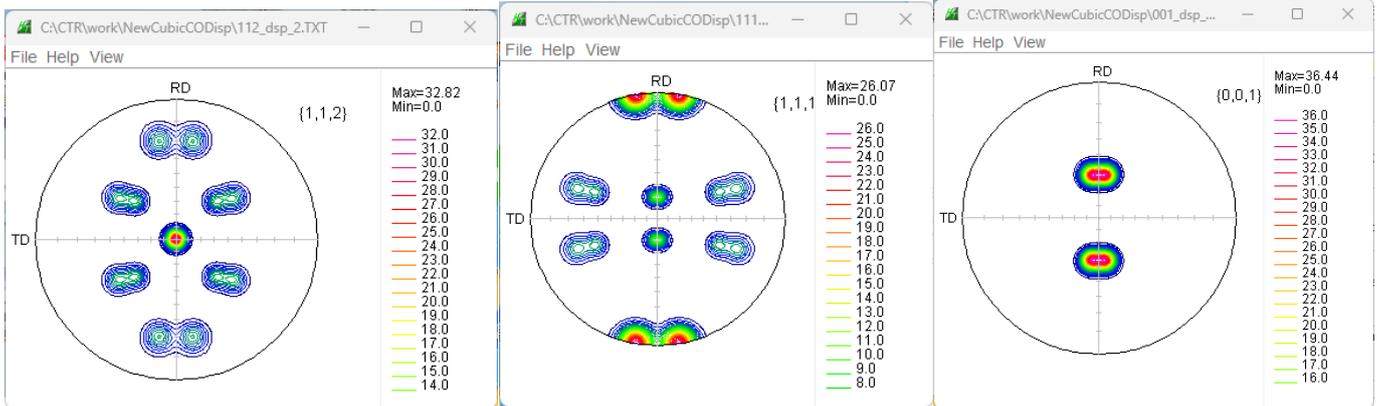
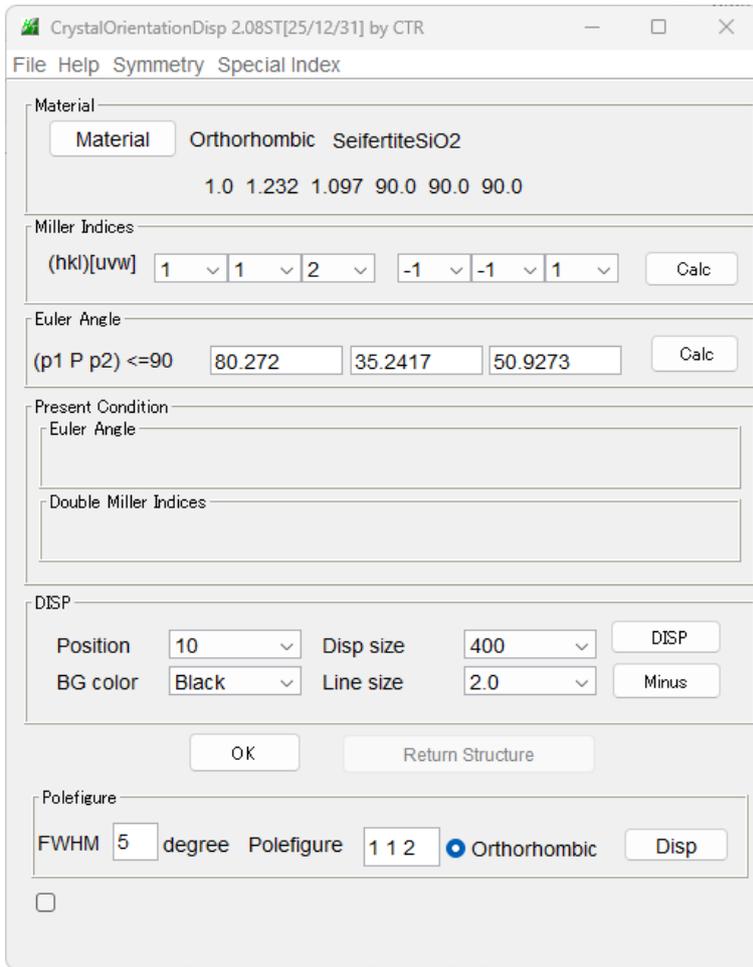




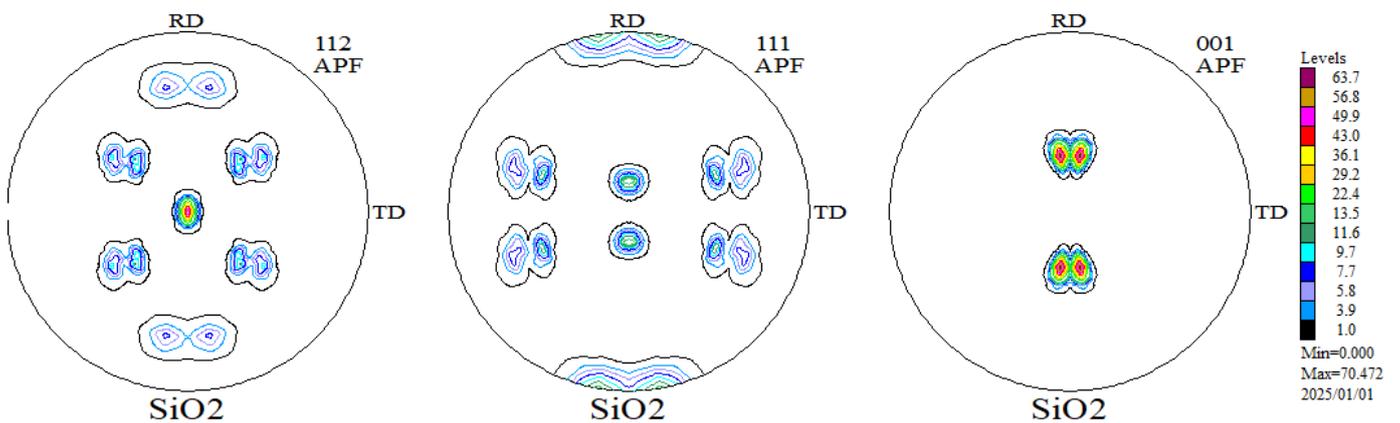
LaboTex

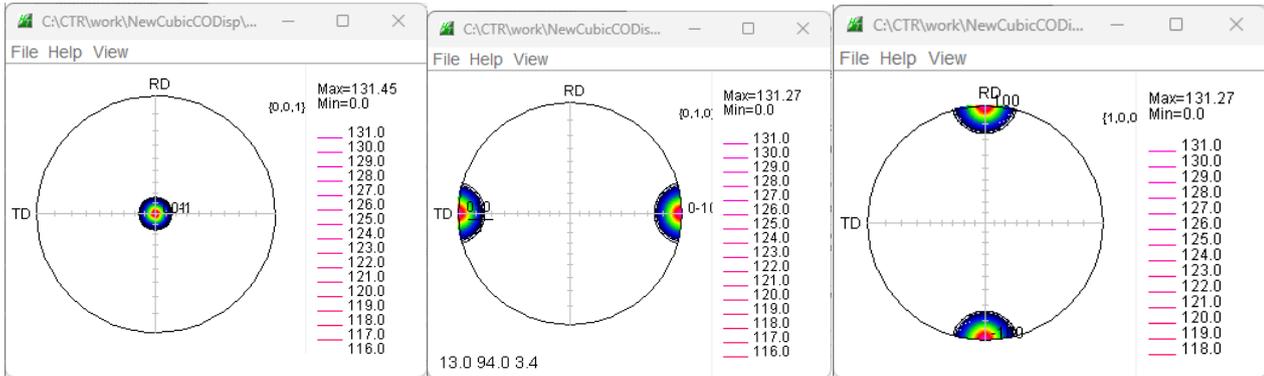
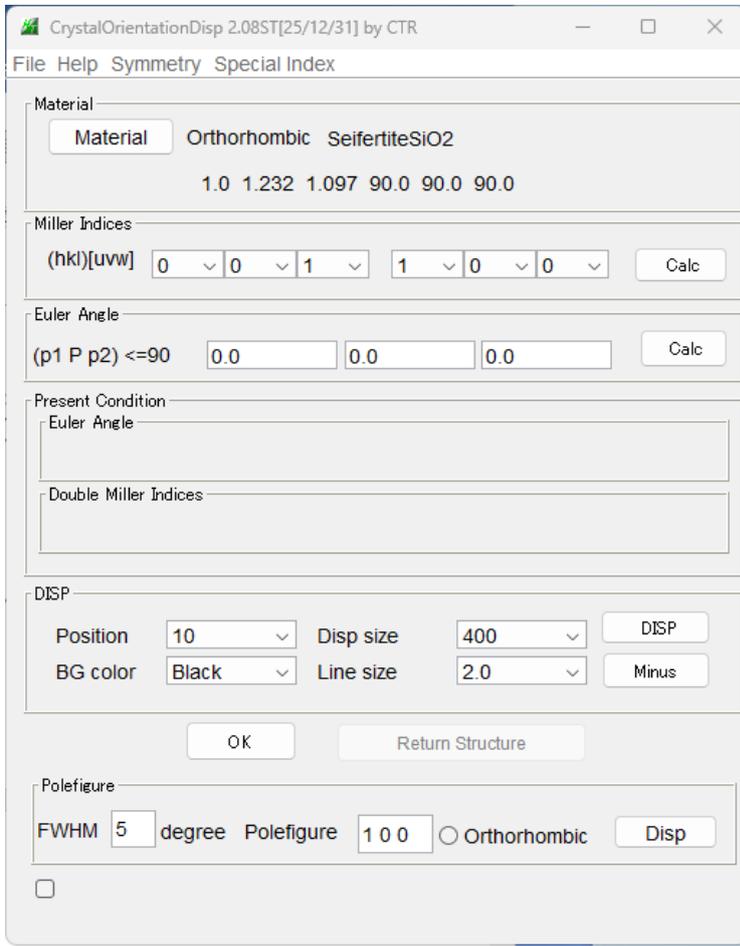


8. 3 Orthorhombic

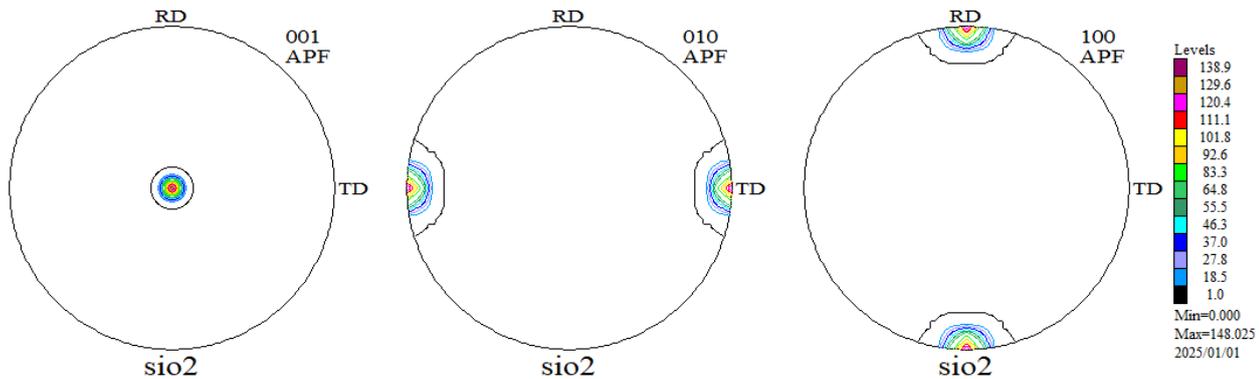


LaboTex





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]

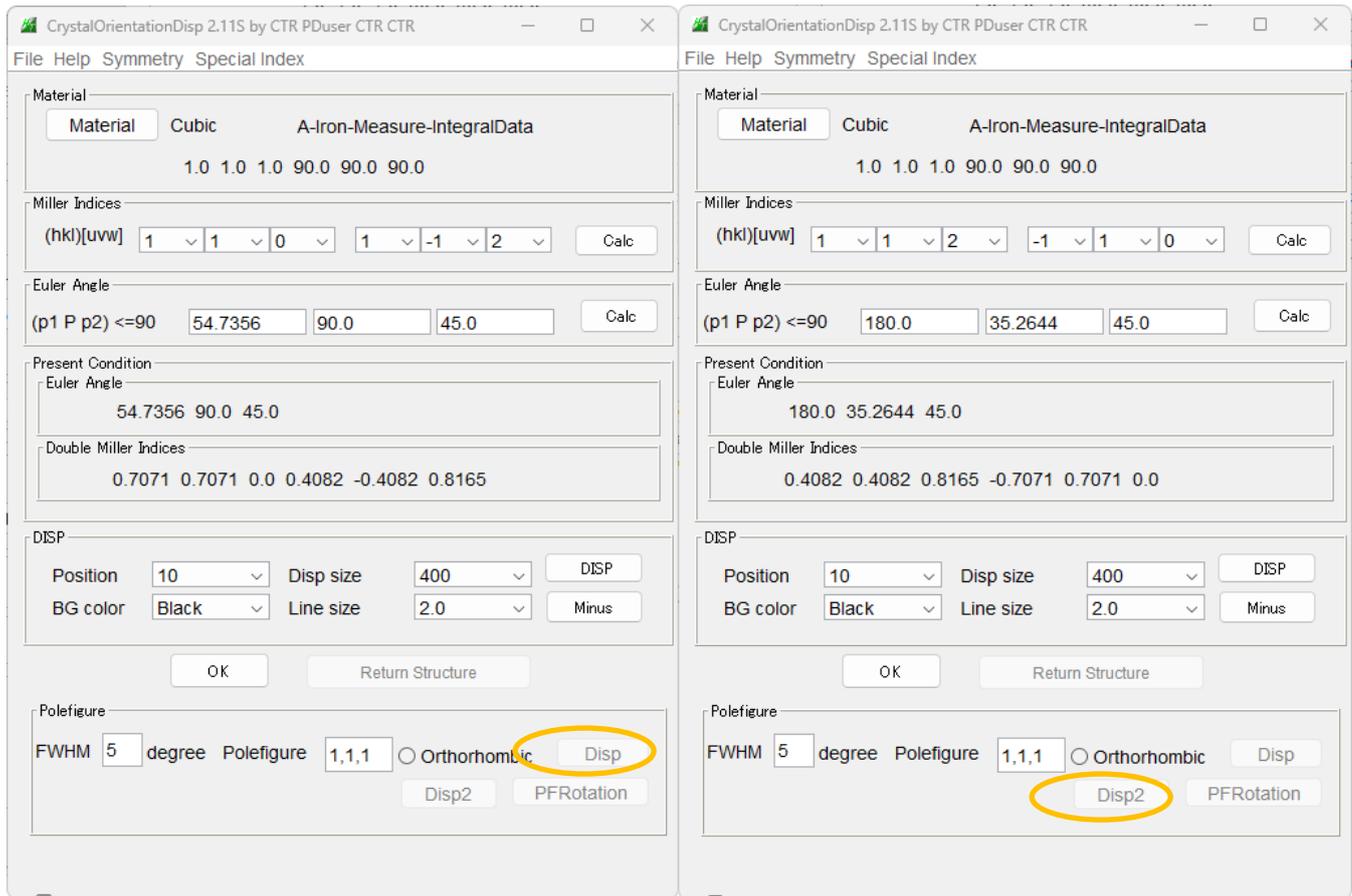
Bottom Section:
(1 1 2)[-1 1 0] → ODF set|hkl|Kuvw → OrientationDisp ResultClear

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

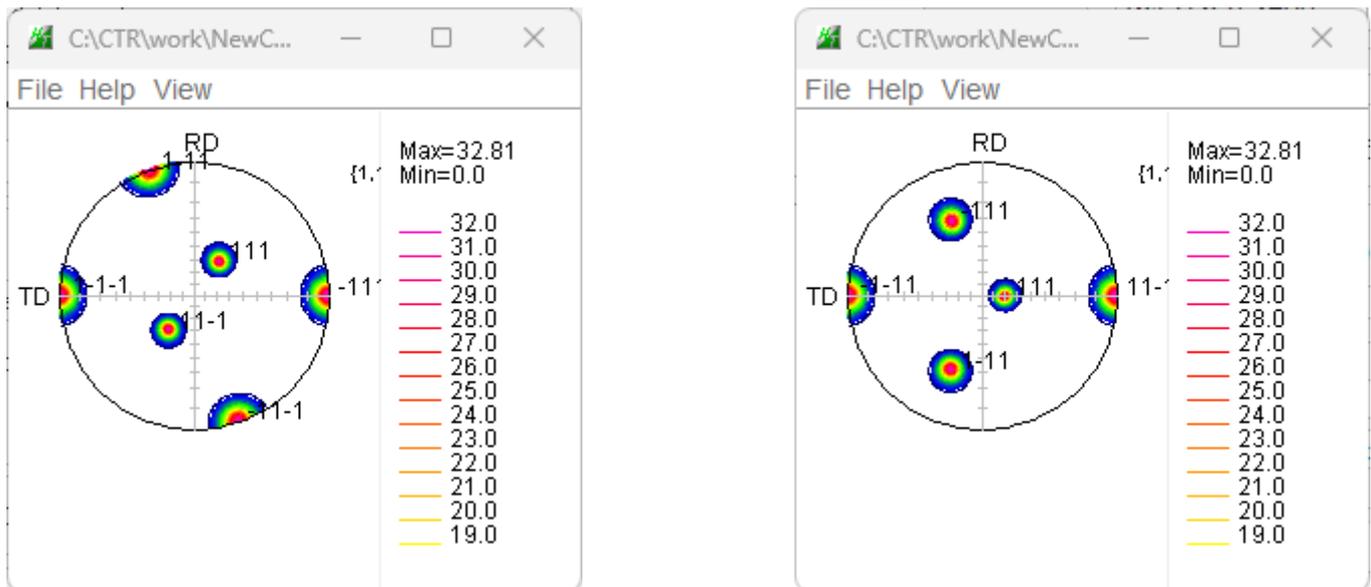
9. 1 CrystalOrientationDispで確認

回転前

回転後



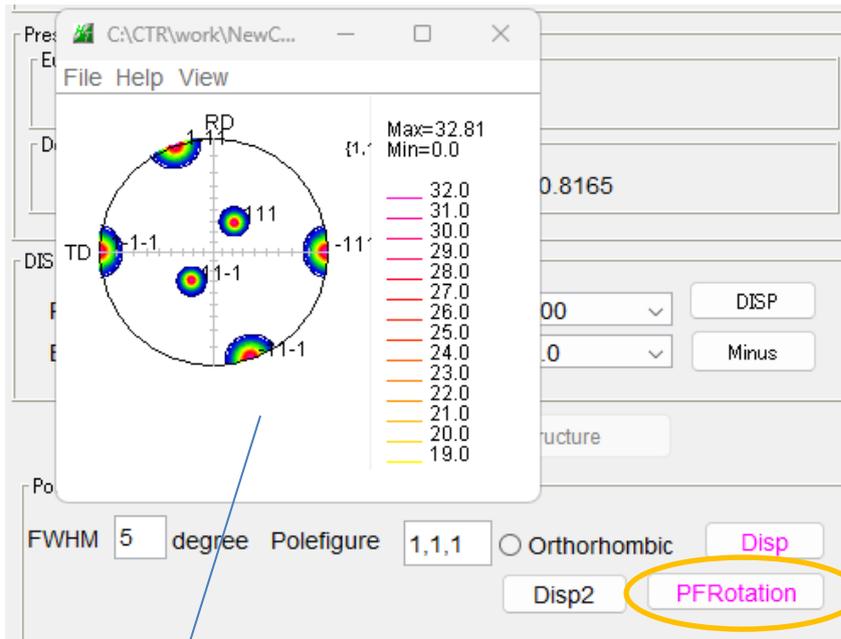
Calc後Disp (回転前) とDisp2 (回転後)



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

