

結晶方位の軸回転を計算する

C r y s t a l R o t a t i o n ソフトウェア

Ver2.01

2025年02月04日

HelperTex Office

概要

塑性加工などから結晶が軸回転し、別の方位に変わる。

この軸回転を計算する。

結晶方位 $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ を、軸 $[uvw]$ に対し回転する計算を行う。

LaboTex では回転軸を材料系ですが、本ソフトウェアでは結晶系で与える。

LaboTex と MTEX の関係は以下を参照してください。

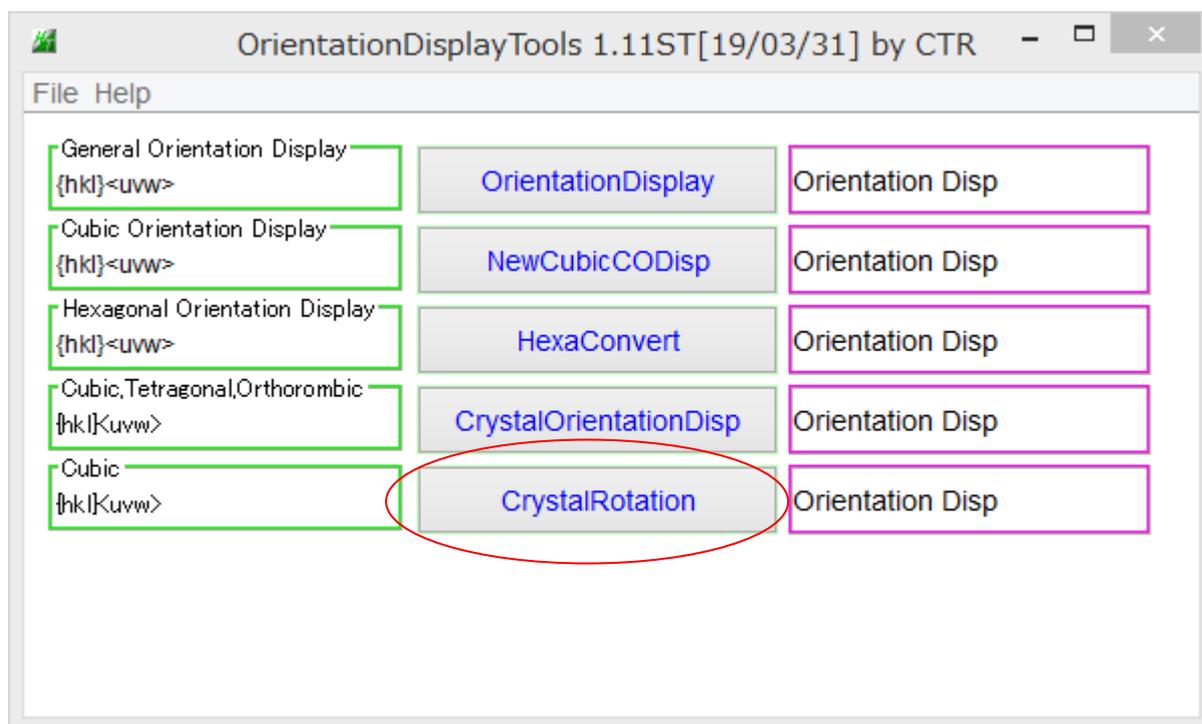
<http://www.geocities.jp/odftex/index.html>

<http://www.geocities.jp/odftex/LaboTex-MTEX-AXISRotation.pdf>

ソフトウェアの起動

C:\¥CTR¥CrystalRotation.jar のダブルクリック

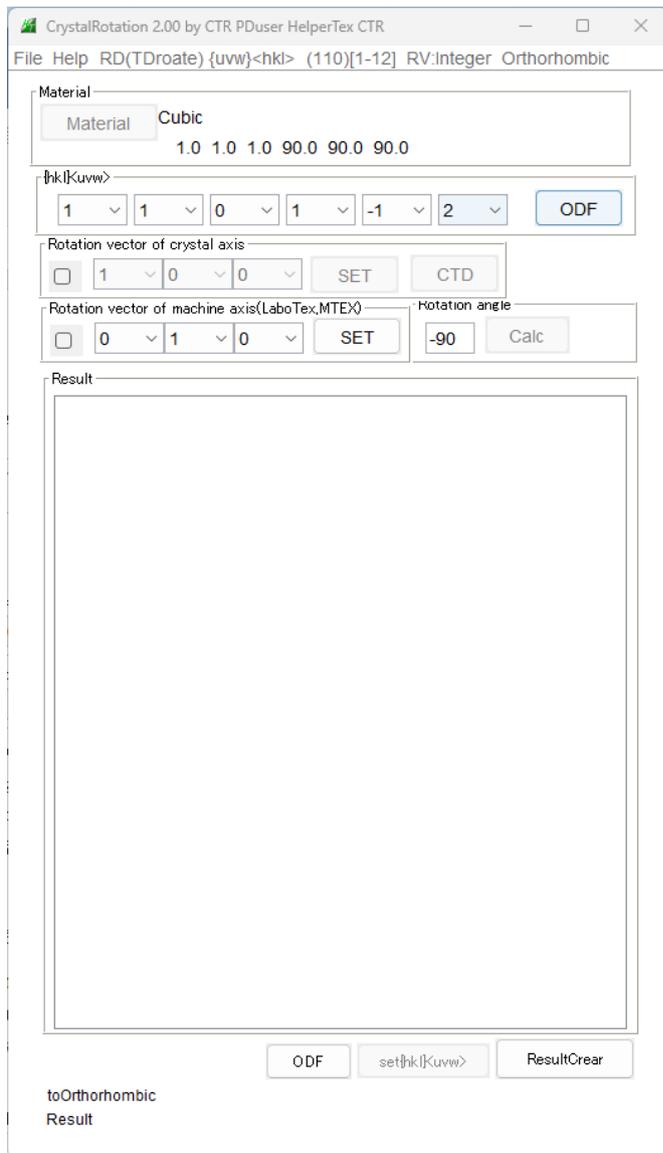
CrystalOrientationTools から



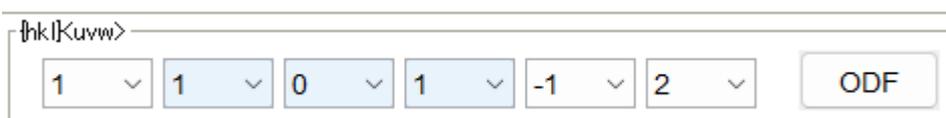
Version 1.13以降、計算結果にNewCalcが表示されない結果は矛盾(誤差)があります。

```
Calc Miller indices ***** NewCalc *****  
{-1.0 1.0 -2.0}<1.0 1.0 0.0>  
{1 1 2}<1 -1 0> (0.0 35.26 45.0)
```

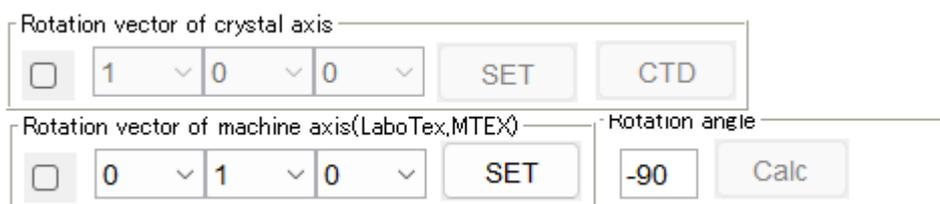
ソフトウェアの使い方 (Ver2.00 以降 ODF 図表示に変更)



開始結晶方位選択、結晶方位図の表示



結晶回転軸と回転角度



結晶系、材料系を選択し入力を行い。

- CTDは結晶方位から計算、Calcで軸回転、Dispで結晶方位図表示
- 結晶系SETで材料系のベクトルを表示
- 材料系SETで結晶系のベクトルを表示

計算

{h k l} <uvw>からEuler角度計算

$$g(\varphi_1\varphi_2) = \begin{bmatrix} \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 - \sin\varphi_1 \sin\varphi_2 \cos\phi & \sin\varphi_1 \cos\varphi_2 + \cos\varphi_1 \sin\varphi_2 \cos\phi & \sin\varphi_2 \sin\phi \\ -\cos\varphi_1 \sin\varphi_2 - \sin\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\phi & -\sin\varphi_1 \sin\varphi_2 + \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\phi & \cos\varphi_2 \sin\phi \\ \sin\varphi_1 \sin\phi & -\cos\varphi_1 \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$$

回転軸から d[] を計算

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

$$g(d, \omega) = \begin{bmatrix} (1-d_1^2)\cos\omega + d_1^2 & d_1d_2(1-\cos\omega) + d_3\sin\omega & d_1d_3(1-\cos\omega) - d_2\sin\omega \\ d_1d_2(1-\cos\omega) - d_3\sin\omega & (1-d_2^2)\cos\omega + d_2^2 & d_2d_3(1-\cos\omega) + d_1\sin\omega \\ d_1d_3(1-\cos\omega) + d_2\sin\omega & d_2d_3(1-\cos\omega) - d_1\sin\omega & (1-d_3^2)\cos\omega + d_3^2 \end{bmatrix}$$

上記より回転された結晶方位を計算

$g(d, \omega) * g(\varphi_1 \Phi \varphi_2)$ を計算する。

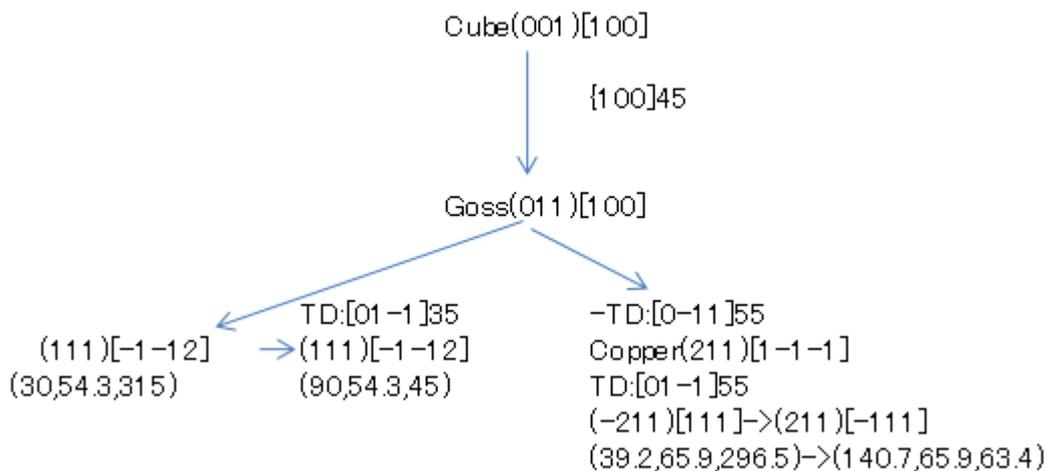
結晶 TD 軸

$$g = \begin{bmatrix} \sin\Phi_{RD} \cos\beta_{RD} & \sin\Phi_{TD} \cos\beta_{TD} & \sin\Phi_{ND} \cos\beta_{ND} \\ \sin\Phi_{RD} \sin\beta_{RD} & \sin\Phi_{TD} \sin\beta_{TD} & \sin\Phi_{ND} \sin\beta_{ND} \\ \cos\Phi_{RD} & \cos\Phi_{TD} & \cos\Phi_{ND} \end{bmatrix}$$

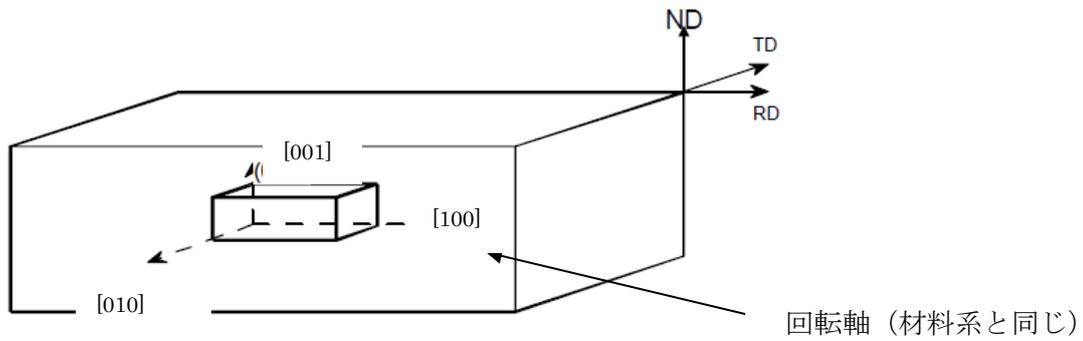
材料系回転軸 $g_z \leftrightarrow$ 結晶系回転軸 g_c

$$g_z = g^{-1} * g_c$$

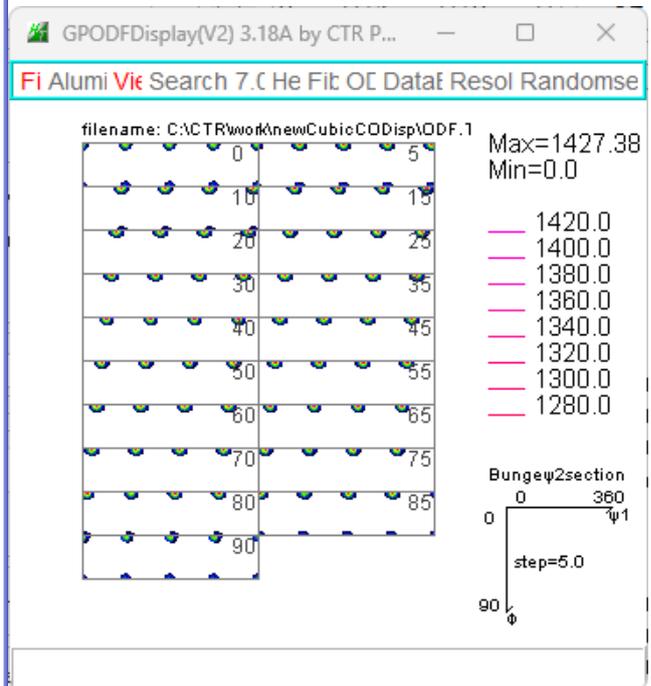
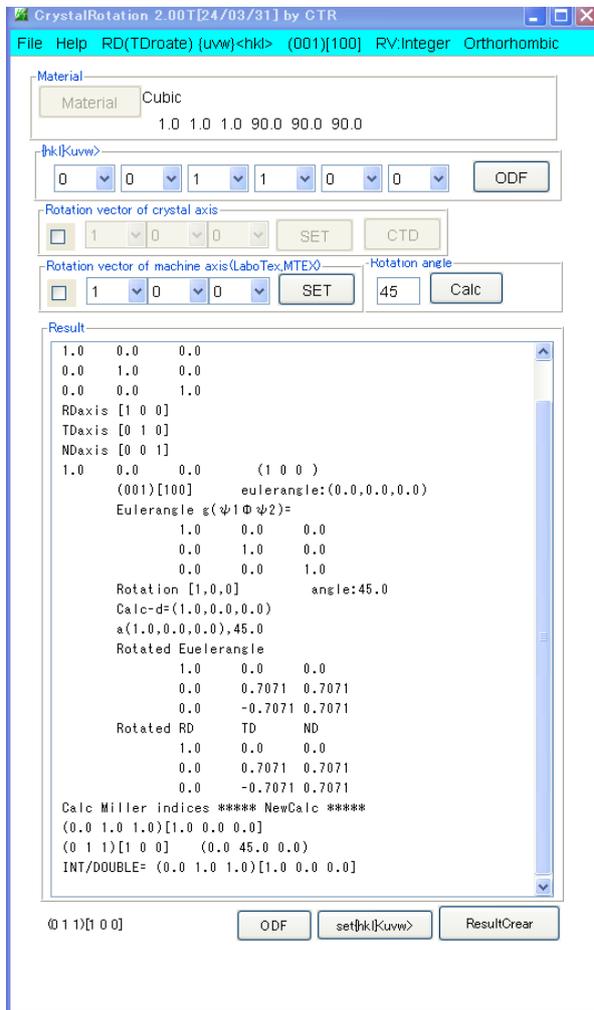
$$g_c = g * g_z$$



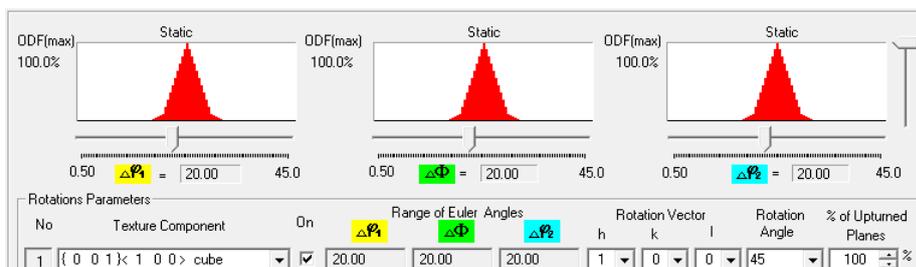
C u b e から G o s s を得る。



CrystalRotation は回転軸を結晶系で指定



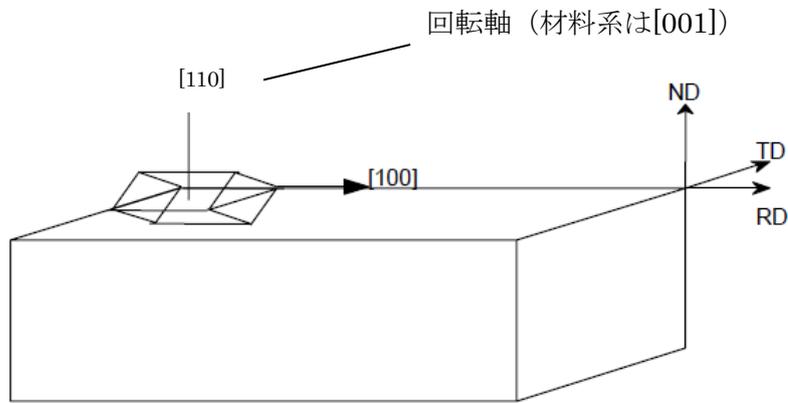
LaboTex では回転軸を材料系で指定



M T E X

odf=rotate(odfc,rotation('axis',xvector,'angle',45*degree))

G o s s から (1 1 1) [- 1 - 1 2] を得る



CrystalRotation は結晶系で回転軸を指定

CrystalRotation 2.00T[24/03/31] by CTR

File Help RD(TDroate) {uvw}<hk> (011)[100] RV:Inter

Material: Cubic
1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0

hk|kuvw>: 0 1 1 1 0 0

Rotation vector of crystal axis: 0 1 -1 SET CTD

Rotation vector of machine axis(LaboTex,MTEX): 0 1 0 SET 35

Result:

```

0.4056 0.7071 0.5792
0.4056 -0.7071 0.5792
Calc Miller indices ***** NewCalc *****
(-1.0 1.0099 1.0099)[2.0197 1.0 1.0]
(1 1 1)[-1 -1 2] (90.0 54.74 45.0)
INT/DOUBLE= (1.0 0.9902 0.9902)[0.9902 1.0 1.0]

(011)[100] eulerangle:(0.0,45.0,0.0)
Eulerangle g(ψ1Φψ2)=
1.0 0.0 0.0
0.0 0.7071 0.7071
0.0 -0.7071 0.7071
Rotation [0,1,-1] angle:95.0
Calc-d=(0.0,0.7071,-0.7071)
a(0.0,1.0,-1.0),35.0
Rotated Eulerangle
0.8192 -0.4056 -0.4056
0.4056 0.9096 -0.0904
0.4056 -0.0904 0.9096
Rotated RD TD ND
0.8192 0.0 -0.5796
0.4056 0.7071 0.5792
0.4056 -0.7071 0.5792
Calc Miller indices ***** NewCalc *****
(-1.0 1.0099 1.0099)[2.0197 1.0 1.0]
(1 1 1)[-1 -1 2] (90.0 54.74 45.0)
INT/DOUBLE= (1.0 0.9902 0.9902)[0.9902 1.0 1.0]
            
```

(1 1 1)[-1 -1 2] ODF set|hk|kuvw> ResultCreat

Result: (-111)[211] toTriclinic (111)[-1-12] (90.0 54.74 45.0)

GPODFDisplay(V2) 3.18A by...

Fi Alumi Vrk Search 7. He Fit OI Data Reso Randoms

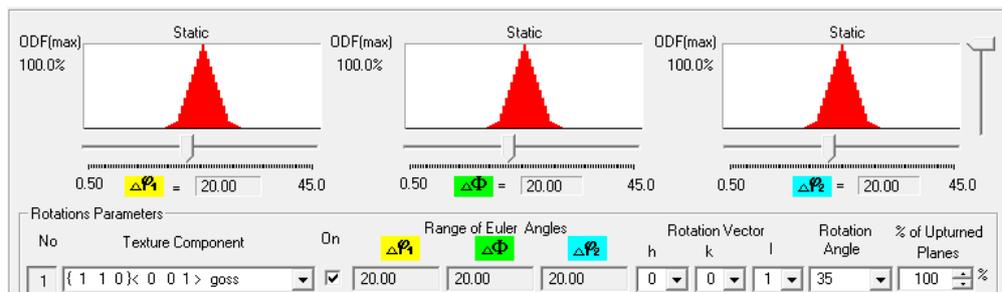
filename: C:\CTR\work\newCubicCODisp\ODF

Max=512.47 Min=0.0

Legend: 500.0, 480.0, 460.0, 440.0, 420.0, 400.0, 380.0, 360.0

Bungeψ2section 0 360 ψ1 step=5.0

LaboTex の回転軸は材料系で回転軸を指定



MTEX

odf=rotate(odf,rotation('axis',zvector,'angle',35*degree))

gossからTD軸回転55degでcopperを得る

CrystalRotation 1.13 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Help ND {hk}<uvw> {110}<001> RV:Integer Orthorhombic

Material: Cubic
1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0

Rotation vector of crystal axis: [-1, 1, 0]

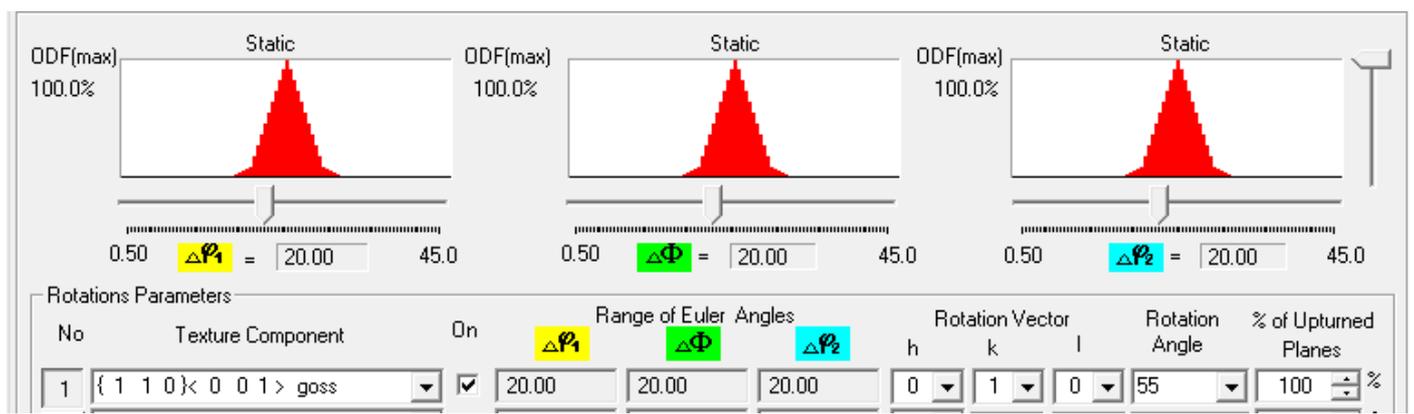
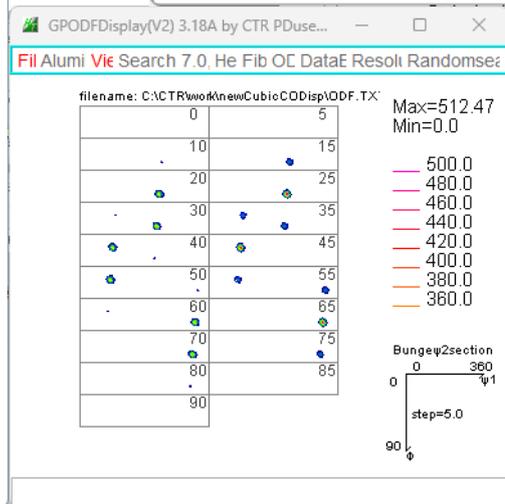
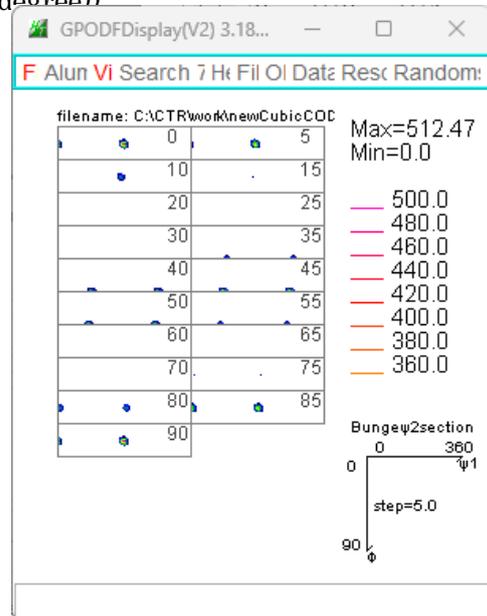
Rotation vector of machine axis (LaboTex, MTEX): [0, 1, 0]

Rotation angle: 55

Result:

```

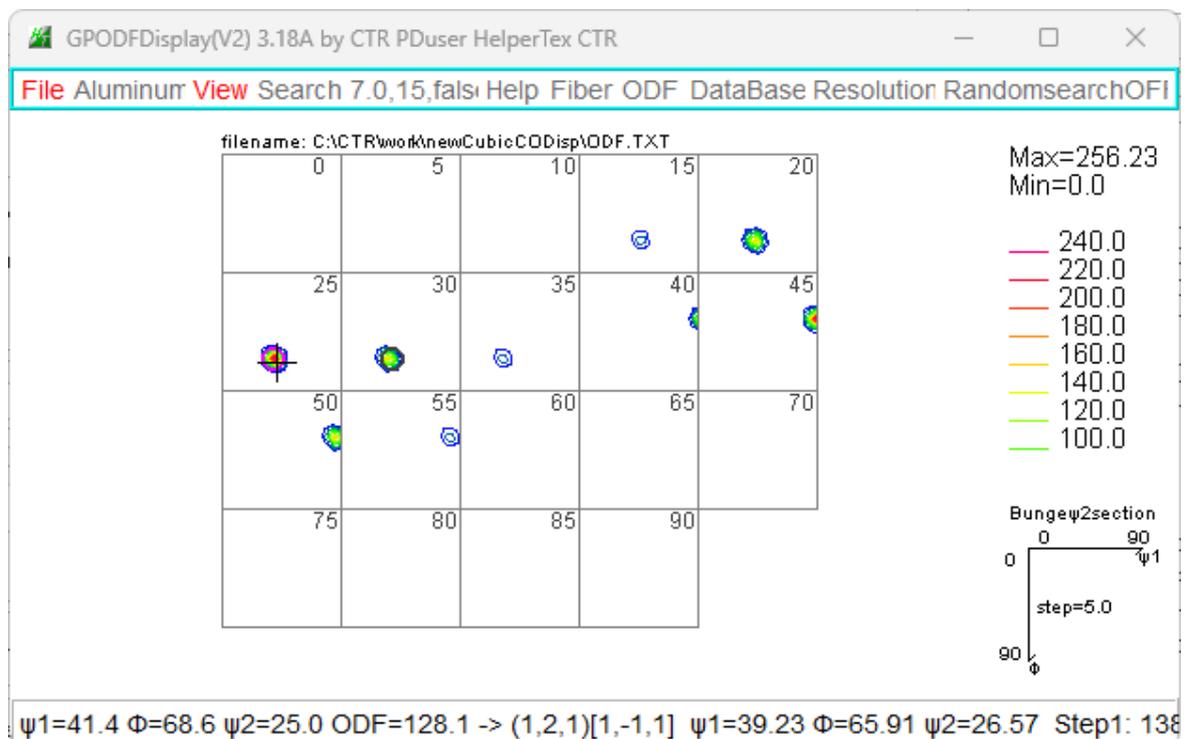
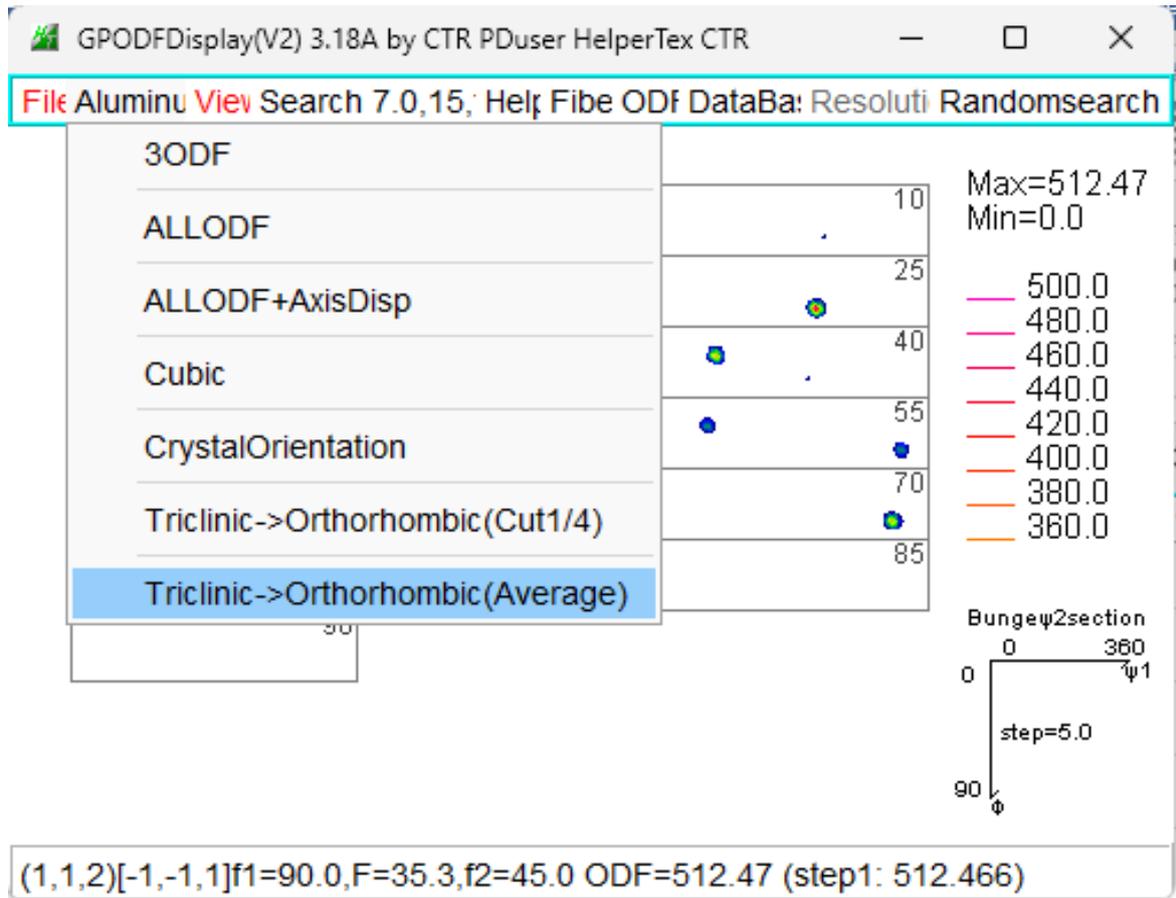
0.0 -1.0 1.0
0.0 1.0 1.0
1.0 0.0 0.0
RDaxis [0 0 1]
TDaxis [-1 1 0]
NDaxis [1 1 0]
-1.0 1.0 0.0 (-1 1 0)
{110}<001> eulerangle:(90.0,90.0,45.0)
Eulerangle g(ψ1Φψ2)=
0.0 0.7071 0.7071
0.0 0.0 0.7071
1.0 0.0 0.0
Rotation [-1,1,0] angle:55.0
Calc-d=(-0.7071,0.7071,0.0)
a(-1.0,1.0,0.0),55.0
Rotated Eulerangle
0.7868 -0.2132 -0.5792
-0.2132 0.7868 -0.5792
0.5792 0.5792 0.5736
Rotated RD TD ND
-0.5792 0.5563 0.4056
-0.5792 -0.1508 0.4056
0.5736 0.4096 0.8192
Calc Miller indices ***** NewCalc *****
(1.0 1.0 2.0197)[-1.0099 -1.01 1.0]
(1 1 2)[-1 -1 1] (90.0 35.26 45.0)
INT/DOUBLE= (1.0 1.0 0.9902)[0.9902 0.9902 1.0]
    
```



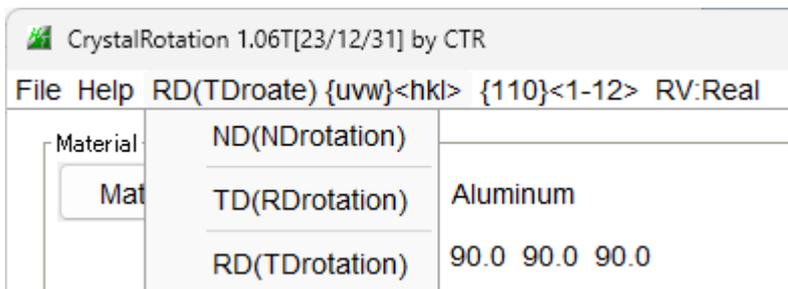
M T E X

odf=rotate(odfc,rotation('axis',yvector,'angle',55*degree))

ODF 図の Tr i i c l i n i c → O r t h o r h o m b i c は G P O D F D i s p l a y で 行 う
C o p p e r を 例 に

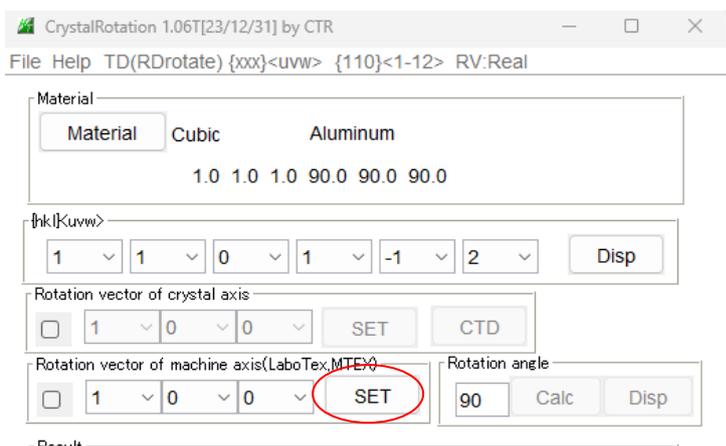


TD、RD、ND方向への回転

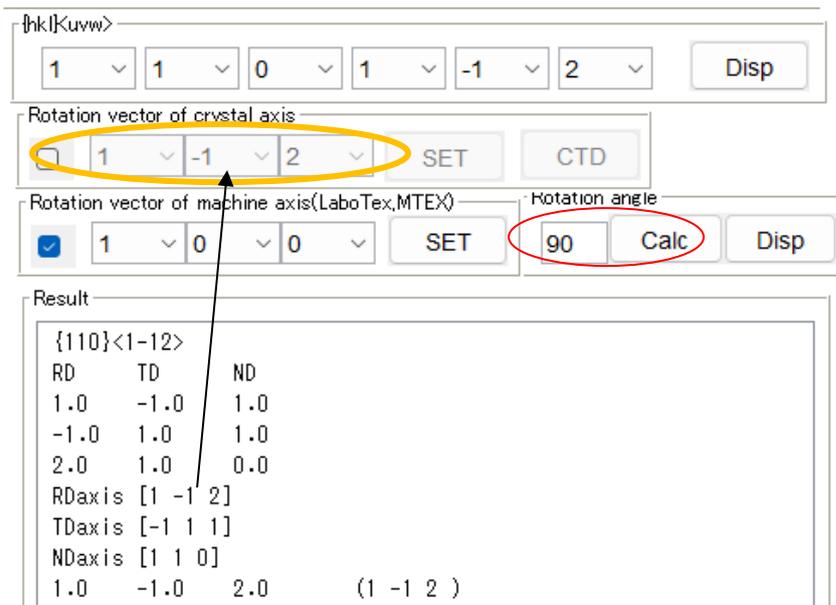


TD(RDrotation)

TD方向への回転はRD軸に対し回転する。



RD 軸が表示される



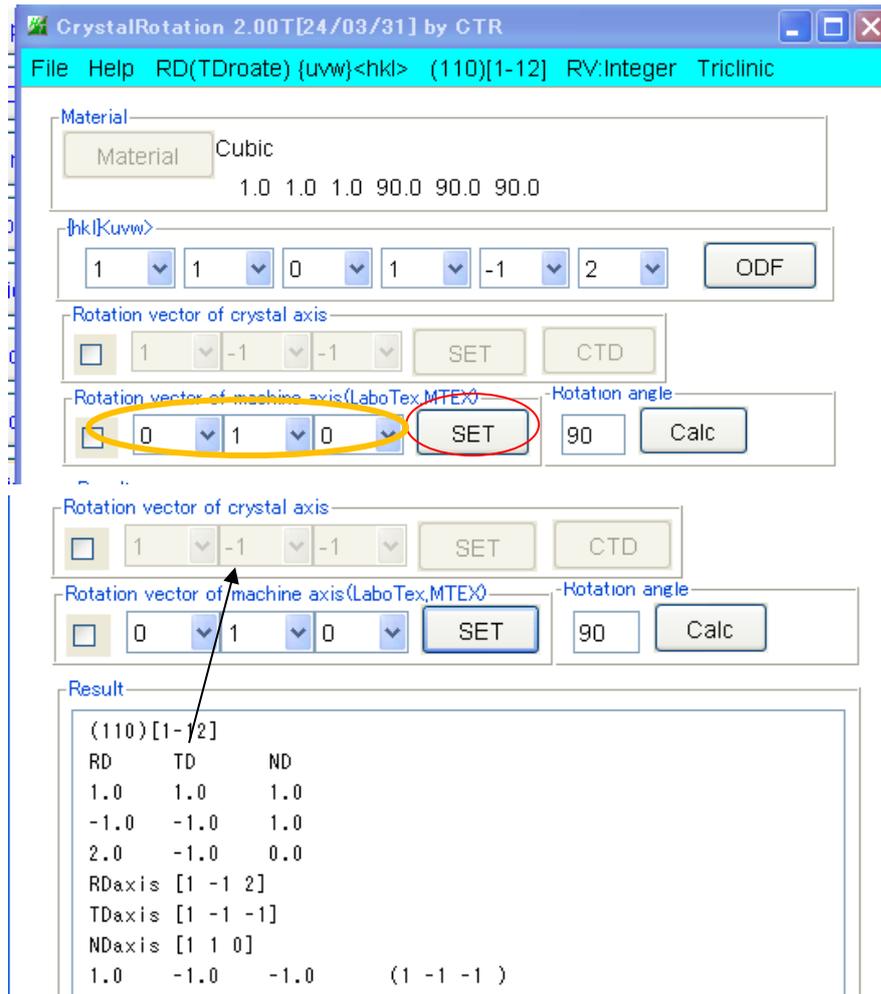
TD面とRD方向が計算される

```
Calc Miller indices ***** NewCalc *****
      (1.0 -1.0 -1.0)[1.0 -1.0 2.0]
      (1 -1 -1)[1 -1 2]   (90.0 125.26 135.0)
INT/DOUBLE= (1.0 1.0 1.0)[1.0 1.0 1.0]
```

通常、計算される { h k l } < u v w >は、{TD}<RD>である

RD(TDrotation)

RD 方向への回転は TD 軸に対して回転

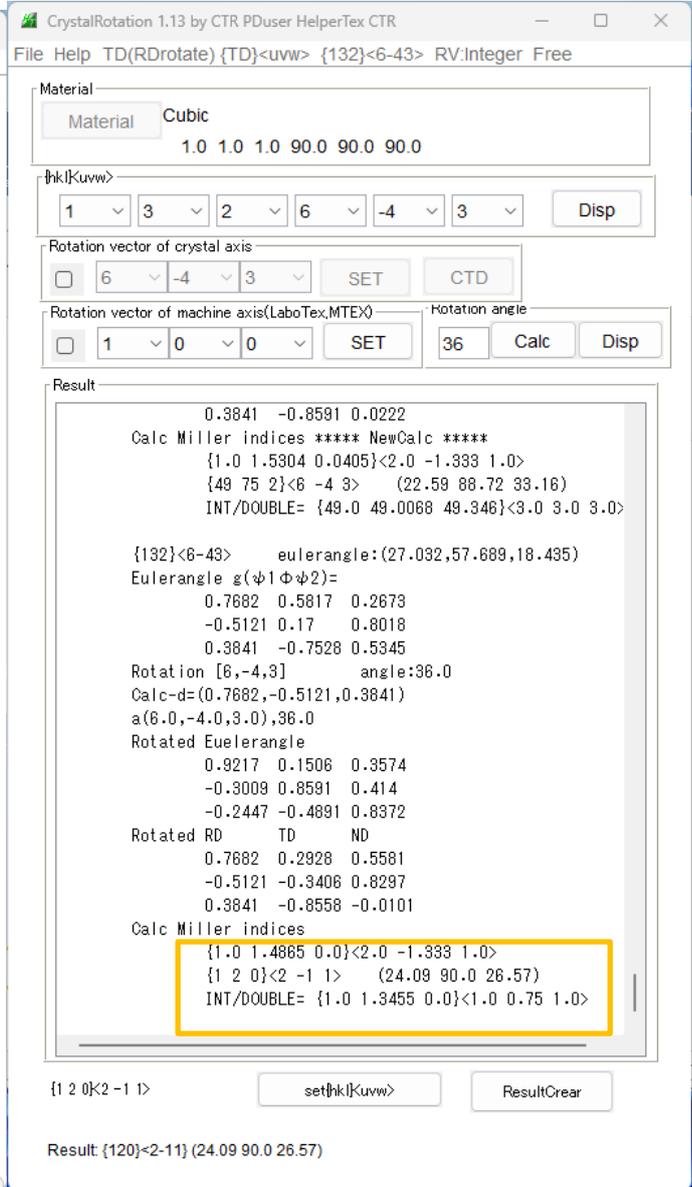
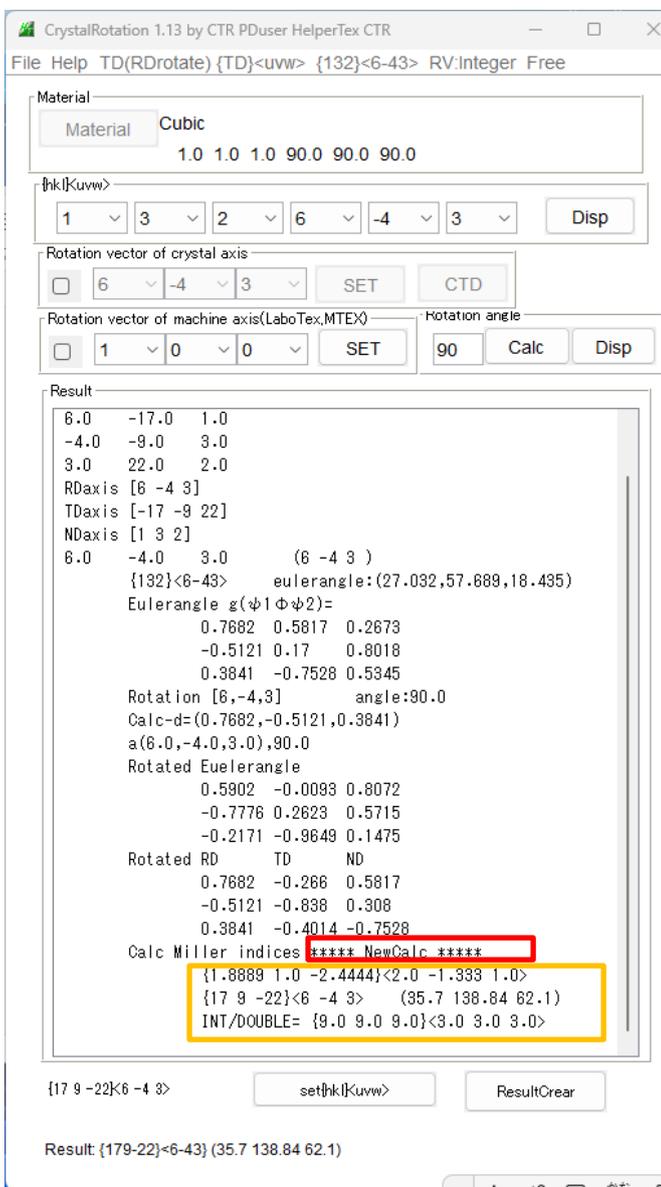


```
Calc Miller indices ***** NewCalc *****
(-1.0 1.0 -2.0)[1.0 1.0 0.0]
(1 1 2)[-1 1 0] (180.0 35.26 45.0)
INT/DOUBLE= (1.0 1.0 1.0)[1.0 1.0 0.0]
```

面と方向が入れ替わる{RD}<ND>

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

注意：計算は Triclinic で行われ、Triclinic 外の方位は Triclinic に変換される



newCalc が表示された整数化では、 $\{h\ k\ l\}$ の整数化、 $\langle u\ v\ w \rangle$ の整数化は単独に行われ $h*u+k*v+l*w=0$ の場合に $\{h\ k\ l\} \langle u\ v\ w \rangle$ に採用し表示している
 newCalc が表示されていない結果には矛盾が含まれています。

矛盾：時、若干のずれが発生する

```
{1.0 1.4865 0.0}<2.0 -1.333 1.0>
{1 2 0}<2 -1 1> (24.09 90.0 26.57)
INT/DOUBLE= {1.0 1.3455 0.0}<1.0 0.75 1.0>
```

整数化出来ていない場合

$$1.3455 = 2 / 1.4865$$

$$0.75 = -1 / -1.333$$

INT/DOUBLE で変換精度を確認してください。

CrystalOrientationDispと連携

回転前後の極局点図比較

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
Buttons: 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:(54.736,90.0,45.0)
Eulerangle g(ψ 1 Φ 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 | ResultCreat

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