

# 材料の回転（機械軸回転、結晶軸回転）

2023年12月05日

*HelperTex Office*

## 概要

材料を扱う場合、方位の回転を考えることがあります。

例えば、c u b e 方位からG o s s 方位を得る回転では、

機械軸 (RD軸) を 45 度回転、あるいは結晶軸  $[100]$  を 45 度回転で求められる

しかし、G o s s 方位からC o p p e r 方位では

機械軸 (TD軸) を 55 度回転、あるいはTD軸の結晶軸  $[1-10]$  を 55 度の回転で求める

CrystalRotation 1.14 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Help RD(TDroate){uvw}<hkl> (110)[001] RV:Integer Orthorhombic

Material

Material Cubic

1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0

hkl|Kuvw>

1 1 0 0 0 1 Disp

Rotation vector of crystal axis

1 -1 0 SET CTD

Rotation vector of machine axis(LabTex,MTEX)

0 1 0 SET

Rotation angle

55 Calc Disp

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(ψ1 φ ψ2)=
0.0 0.7071 0.7071
0.0 -0.7071 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 0.7071 0.4056
0.5792 -0.7071 0.4056
0.5736 0.0 -0.8192
Calc Miller indices ***** NewCalc *****
(1.0 1.0 -2.0197)[1.0099 1.01 1.0]
(1 2 1)[1 -1 1] (39.23 65.91 26.57)
INT/DOUBLE- (1.0 1.0 0.9902)[0.9902 0.9902 1.0]
```

(1 2 1)[1 -1 1] set|hkl|Kuvw> ResultCreat

Result: (11-2)[111] toOrthorhombic (121)[1-11] (39.23 65.91 26.57)

TD 軸を結晶軸に変換して計算が行われる。

この変換検証ツールを紹介します。

ツール

結晶方位の回転

CrystalRotation

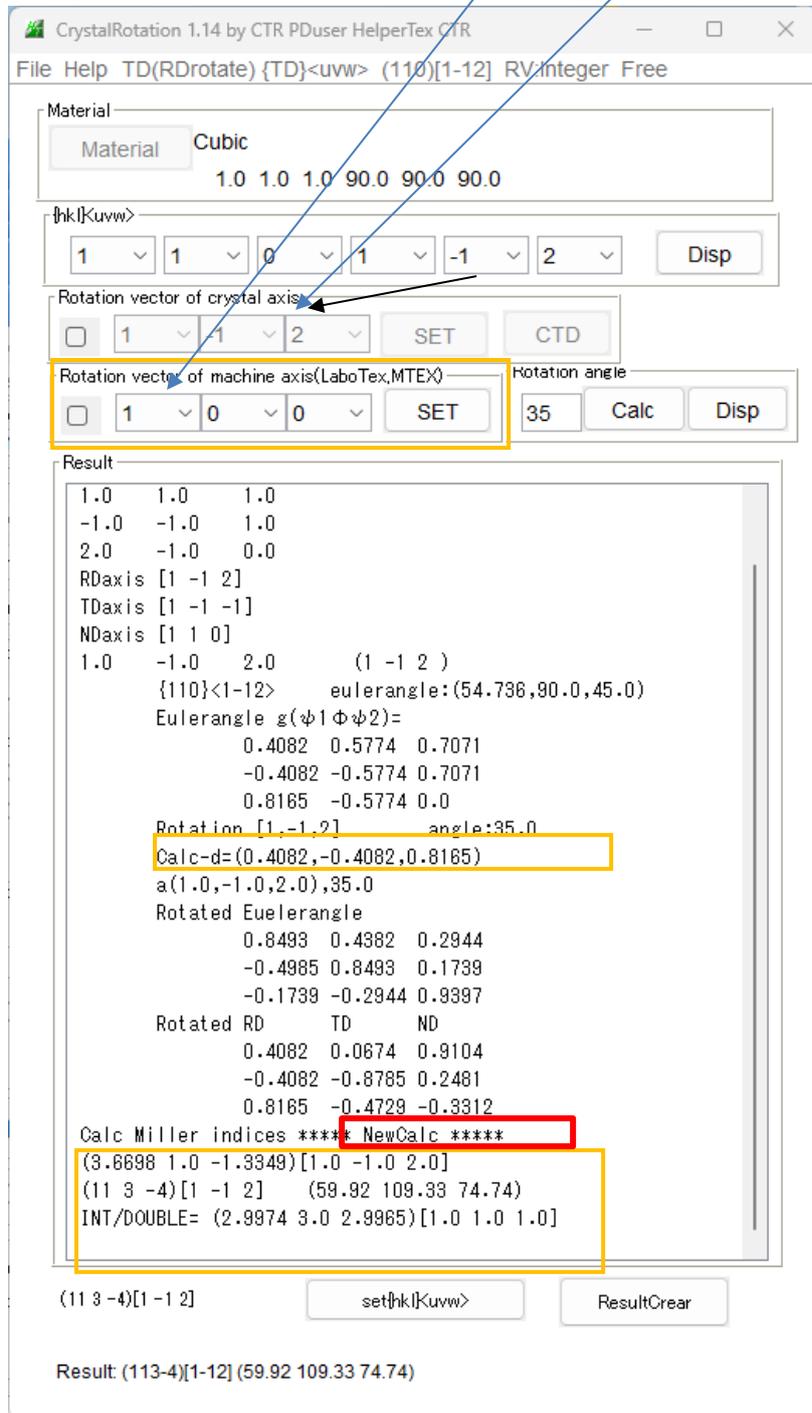
極点図の作成

CrystalOrientationD

極点図の回転

PFRotation

検証する方位 {110} <1-12>を RD 軸 [1-12] 軸に 35 回転で{113-4}<1-12>を得る



材料軸を指定し、結晶軸に変換し回転を行う。

\*\*\*\*\* NewCalc \*\*\*\*\*表示は計算結果に矛盾はありません。 INT/DOUBLE がほぼ整数に近い

## 作業

RD回転により $\{11\bar{3}4\}\langle 1\bar{1}2\rangle$ が得られるのであれば、 $\{110\}\langle 1\bar{1}2\rangle$ 方位 $\{11\bar{3}4\},\{1\bar{1}2\}$ の極点図のRDを35度回転でND、RDが判明する。

CrystalOrientationにて $\{110\}\langle 1\bar{1}2\rangle$ 方位の $\{11\bar{3}4\},\{1\bar{1}2\}$ 極点図作成

PFRotationにてRD軸35度回転しND、RDを判定

CrystalOrientationDにて{113-4},{1-12}極点図作成  
 X軸をSouthとして{110} <1-12>方位計算

CrystalOrientationD 2.03 by CTR PDuser Help:Tex:CTR

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

PoleFigure

001  Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is South.

Alpha(center=0) 0 Beta(RD=180) 0 hkl 1 1 0  
 90 180 1 -1 2

calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM 0.5 Max 100 Mini 0.1

calc{hkl}<uvw> maxIndex 15 extentAngle 1.0  calcTD  Other(h,k,l) 11,3,4

Alpha	Beta	
0.0	0.0	1 1 0
90.0	180.0	1 -1 2

U-matrix

-0.4082482904638631	0.4082482904638631	-0.8164965809277259
-0.5773502691896257	0.5773502691896257	0.5773502691896258
0.7071067811865476	0.7071067811865476	0.0

本ソフトウェアでは、データ入力時(Southモード)はRD角度180度として入力  
 ラウエカメラデータでbeta=0がEastの場合、Eastモードでラウエカメラデータを入力  
 極点測定データの場合、直接極点データ(TXT2)を選択

{1 1 3 4}極点図作成

CrystalOrientationD 2.03 by CTR PDuser HelperTex CTR

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

PoleFigure  
 001  Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is South.

Alpha(center=0) 0 Beta(RD=180) 0 hkl 0 1 1  
 90 180 1 0 0

Calc PoleFigure  
 11 3 4  
 11 4 3  
 3 4 11  
 3 11 4  
 4 11 3  
 4 3 11

112  
 Clear  
 Set  
 Append  
 All

calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM 0.5 Max 100 Mini 0.1

calc{hkl}<uvw> maxIndex 15 extentAngle 1.0  calcTD

Other(h,k,l) 11,3,4

Alpha Beta  
 0.0 0.0 0 1 1  
 90.0 180.0 1 0 0

U-matrix  
 -1.0 -8.659560562354932E-17 8.659560562354932E-17  
 1.2246467991473532E-16 -0.7071067811865475 0.7071067811865475  
 0.0 0.7071067811865476 0.7071067811865476

CrystalOrientationD 2.03 by CTR PDuser HelperTex CTR

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

PoleFigure  
 001  Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is South.

Alpha(center=0) 0 Beta(RD=180) 0 hkl 1 1 0  
 90 180 1 -1 2

Calc PoleFigure  
 11 3 4  
 11 4 3  
 3 4 11  
 3 11 4  
 4 11 3  
 4 3 11

112  
 Clear  
 Set  
 Append  
 All

calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM 0.5 Max 100 Mini 0.1

calc{hkl}<uvw> maxIndex 15 extentAngle 1.0  calcTD

Other(h,k,l) 11,3,4

CalcPoleFigure  
 Direction Alpha  
 -3 4 -11 86.65  
 -3 11 -4 62.08  
 -4 11 -3 65.82  
 -3 4 11 86.65  
 -3 11 4 62.08  
 -4 11 3 65.82  
 11 -3 -4 62.08  
 11 -4 -3 65.82  
 4 -3 -11 86.65  
 11 -3 4 62.08  
 11 -4 3 65.82  
 4 -3 11 86.65  
 11 3 -4 34.99  
 11 4 -3 28.62  
 3 4 -11 65.82  
 3 11 -4 34.99  
 4 11 -3 28.62  
 4 3 -11 65.82  
 11 3 4 34.99  
 11 4 3 28.62  
 3 4 11 65.82  
 3 11 4 34.99  
 4 11 3 28.62  
 4 3 11 65.82  
 11 3 4 34.99  
 11 4 3 28.62  
 3 4 11 65.82  
 3 11 4 34.99  
 4 11 3 28.62  
 4 3 11 65.82

C:\CTR\work\CrystalOrientationD\1134\_dsp\_2.TXT

File Help View

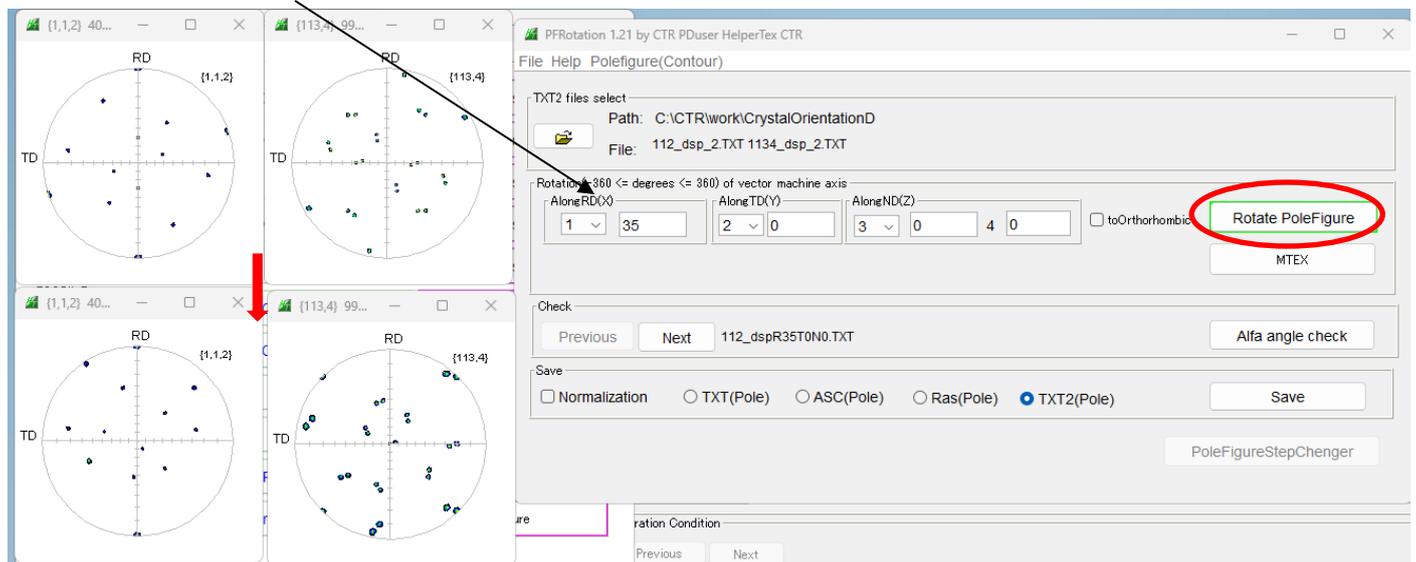
Max=99.24  
 Min=0.1

99.0  
 98.0  
 97.0  
 96.0  
 95.0  
 94.0  
 93.0  
 92.0  
 91.0  
 90.0  
 89.0  
 88.0  
 87.0  
 86.0  
 85.0  
 84.0  
 83.0  
 82.0  
 81.0  
 80.0  
 79.0  
 78.0  
 77.0  
 76.0  
 75.0  
 74.0  
 73.0  
 72.0

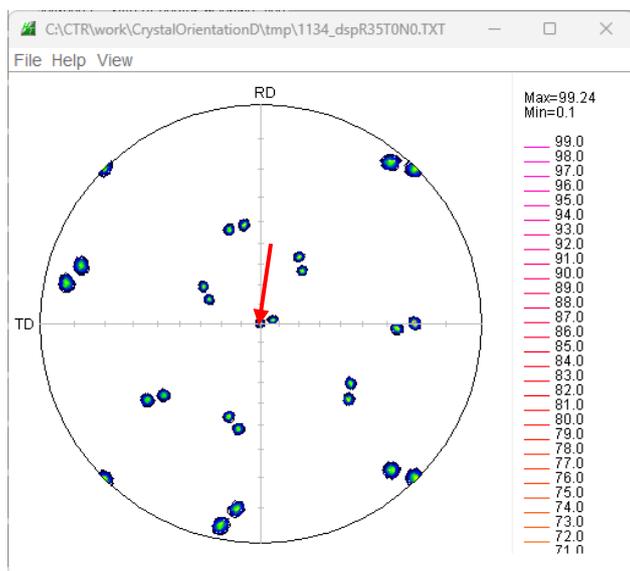
Initialize File



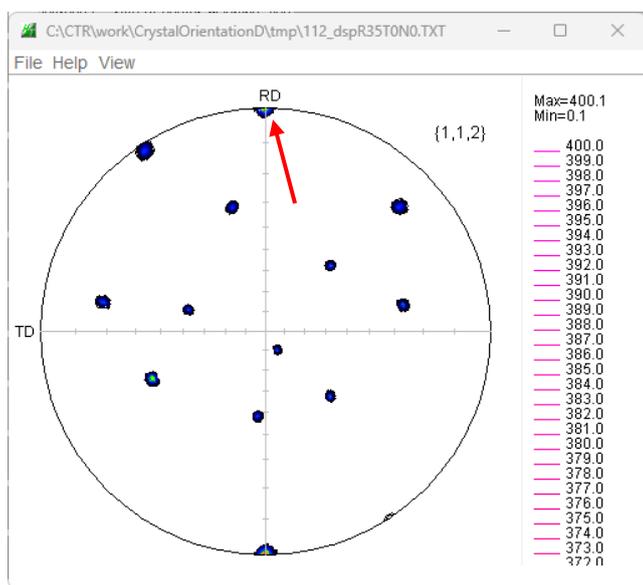
極点図を RD 軸に 35 度回転



ND 1134\_dspR35T0N0.TXT



RD 112\_dspR35T0N0.TXT



{113-4}<1-12>が得られている。

使用したソフトウェアのバージョンは

C r y s t a l O r i e n t a t i o n D ( V e r . 2 . 0 3 )

C r s t a l R o t a t i o n ( V e r . 1 . 1 3 )

P F R o t a t i o n ( V e r . 1 . 2 1 )

P o l e F i g u r e C o n t o u r D i s p l a y ( V e r . 1 . 2 1 )

組み合わせの場合、バージョンは同等以降で実現可能

異なる場合、問い合わせください。