

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 [1 0 0] 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 - 1 0] 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

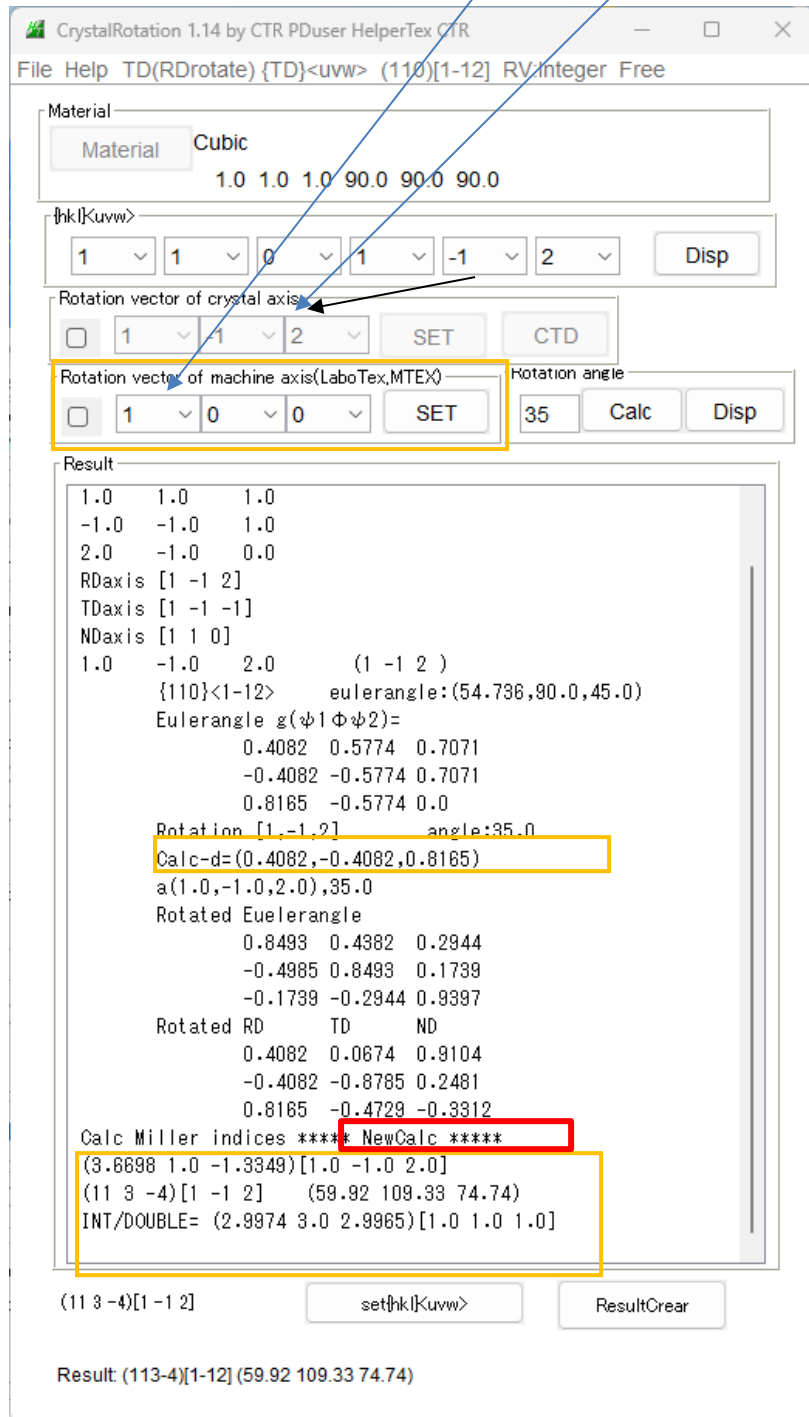
極点図の作成

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

同様に { 1 1 2 } も作成

CrystalOrientationD 2.03 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Help Blind-40 CreatePFStep:1.0 hkl disp=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

CalcPoleFigure
 1 1 -2
 1 2 -1
 2 1 -1
 1 1 2
 1 2 1
 2 1 1

112 Clear Set Append All

calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM 0.5 Max 100 Mini 0.1

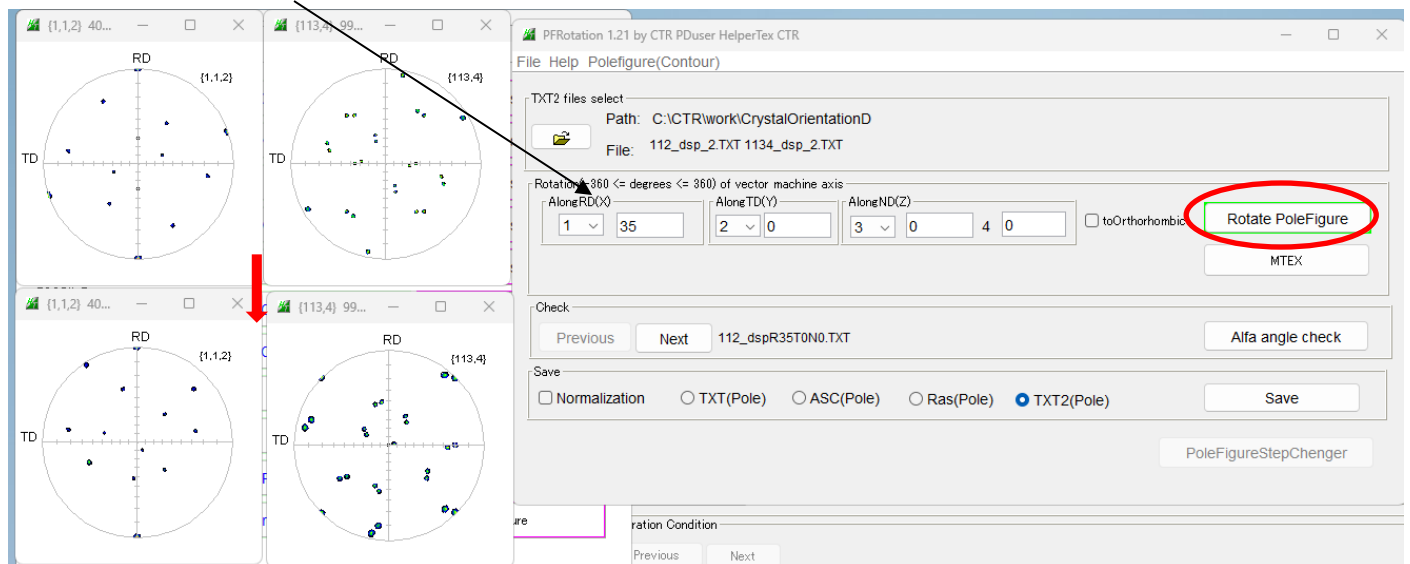
calc{hkl}<uvw> maxIndex 15 extentAngle 1.0 calcTD Other(h,k,l) 1,1,2

Direction	Alpha	Beta
-1 1 -2	90.0	0.0
-1 2 -1	73.22	29.5
-1 1 2	90.0	109.47
-1 2 1	73.22	79.98
1 -1 -2	90.0	-70.53
2 -1 -1	73.22	-100.02
1 -1 2	90.0	180.0
2 -1 1	73.22	-150.5
1 1 -2	54.74	-35.26
1 2 -1	30.0	0.0
2 1 -1	30.0	-70.53
1 1 2	54.74	144.74
1 2 1	30.0	109.47
2 1 1	30.0	180.0

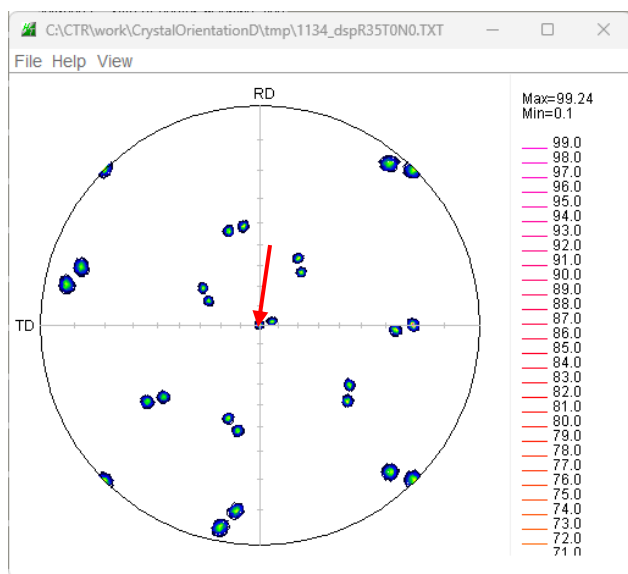
CalcPoleFigure
 Max=400.1
 Min=0.1

Initialize File

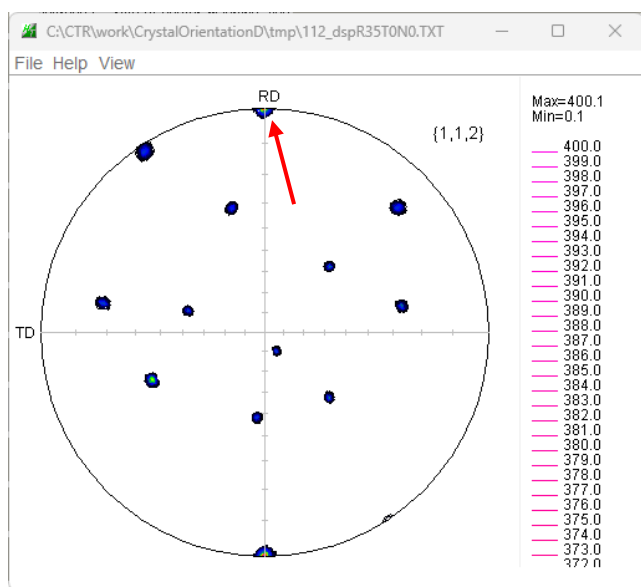
極点図を RD 軸に 35 度回転



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。