

極点図で観察する結晶方位の回転

2023年12月11日

HelperTex Office

概要

Cubicでは、Cube, Copper, Brass, Goss, Sなどの方位があるが、Brass $\{110\} \langle 1-12 \rangle$ を例とすると、ND方向が $[110]$, RD方向が $[1-12]$ であることが分かるが、TD方向は、極点図は、TD軸に90度回転の極点図は、など考えると単純には回答が得られない。

CTRソフトウェアのOrientationToolsには、方位の回転に関するソフトウェアがまとめてあります。



(hkl)[uvw]の回転

(hkl)[uvw]極点図生成

(hkl)極点図の回転

上記ソフトウェアを用いて

- (110)[1-12]方位を TD 軸-90度回転-> (-11-2)[110]が得られる CrystalRotation
- (110)[1-12]方位の方位から(110)、(112)極点図生成 CrysdtalOrientation
- (110)、(112)極点図を TD 軸に-90度回転 PFRotation

にて(110)[1-12]方位を TD 軸-90度回転で ND 方向が[-11-2]、RD 方向が[110]である事を確認する。

(110)[1-12]方位を TD 軸-90 度回転

(110)[1-12]方位の選択

対称性を Free

回転軸を TD 軸

The screenshot shows the CrystalRotation 1.14 software interface. The title bar reads "CrystalRotation 1.14 by CTR PDuser HelperTex CTR". The menu bar includes "File", "Help", "RD(TDroate) {uvw}<hkl> (110)[1-12] RV:Integer Free".

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

Input Section:
hkl|Kuvw>: 1 1 0 1 -1 2 (highlighted in yellow)
Rotation vector of crystal axis: 1 -1 -1 (highlighted in red)
Rotation vector of machine axis(LaboTex MTEX): 0 1 0
Rotation angle: 90 (highlighted in red)

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] (highlighted in red, with a red arrow pointing to it from the label "TD 軸")
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 ψ 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] (0.0 144.74 315.0) (highlighted in purple)
INT/DOUBLE= (1.0 1.0 1.0)[1.0 1.0 0.0]

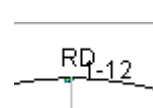
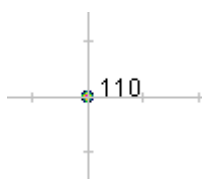
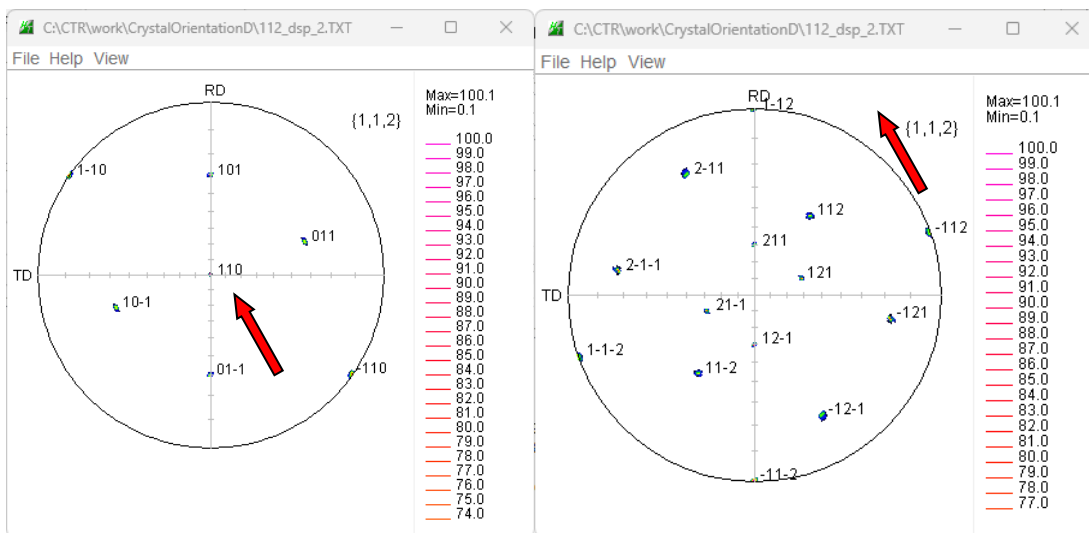
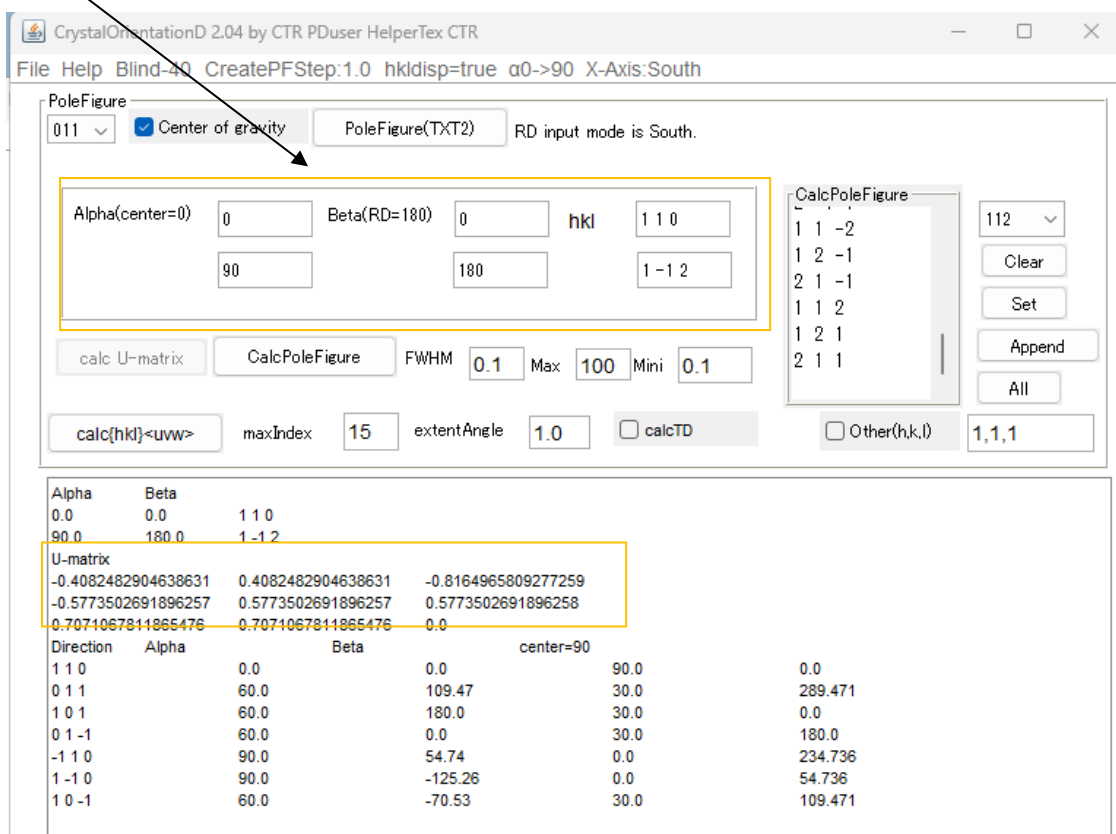
Buttons at the bottom: (-1 1 -2)[1 1 0], set|hkl|Kuvw>, ResultCreat

Bottom status: Result: (-11-2)[110] (0.0 144.74 315.0)

ND 方向 [-11-2]、RD 方向[110]が得られた。Φ>90 で Orthorhombic の範囲外に計算

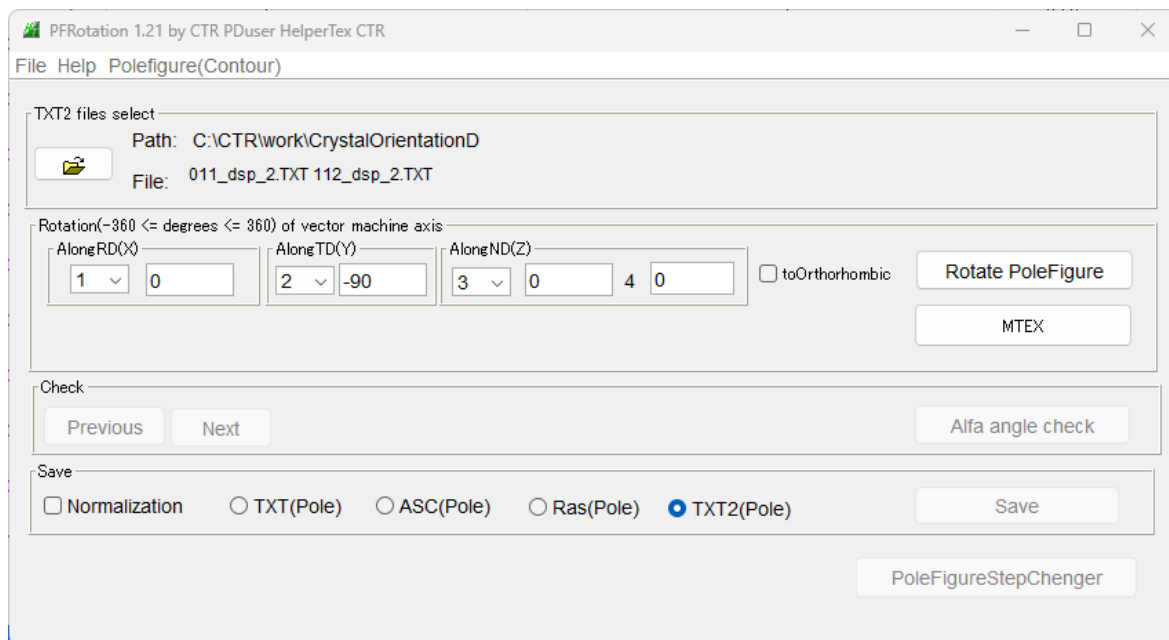
(110)[1-12]方位の方位から(110)、(112)、(111)極点図生成

(110)[1-12]方位生成

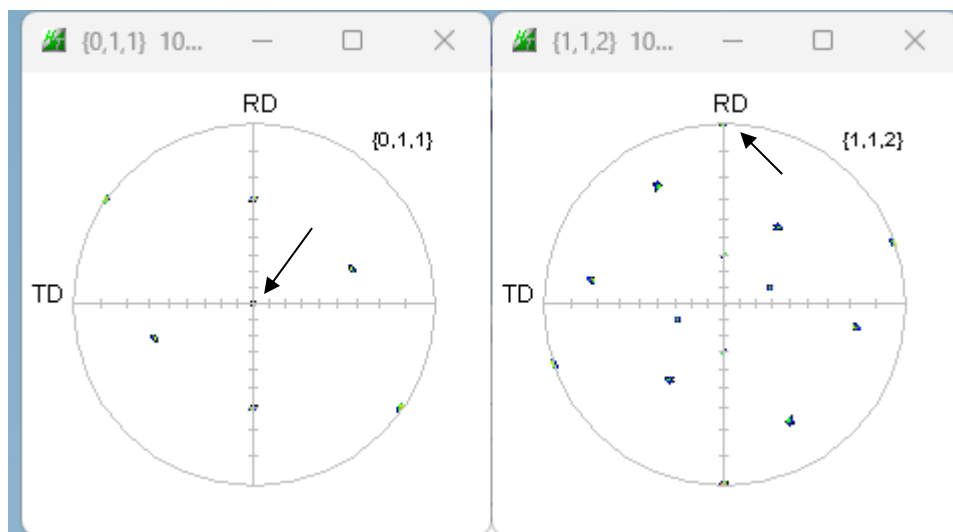


(110)[1-12]方位では(110)極点図の中心 ND に極、(112)極点図の RD(South)に極

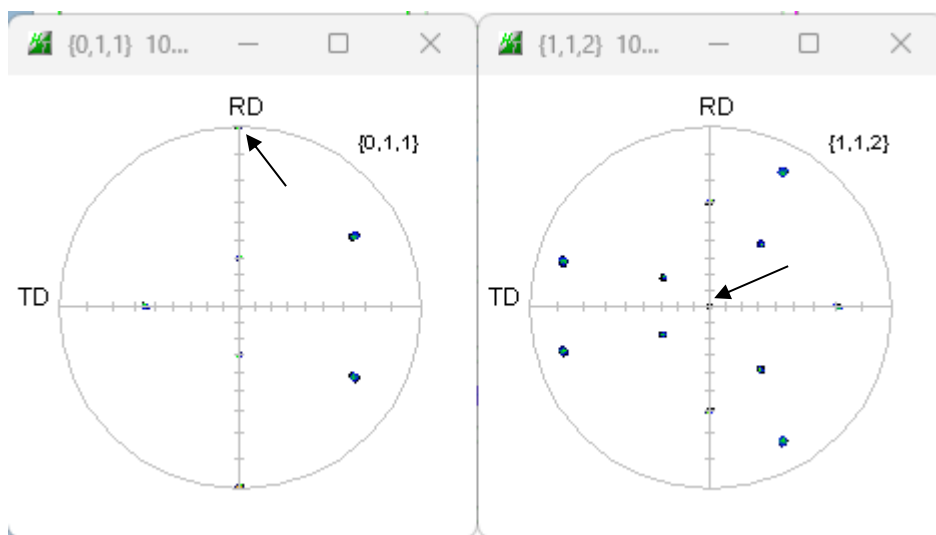
(110)、(112)極点図を TD 軸に-90 度回転



入力



回転



回転により $\{112\} \langle 110 \rangle$ が得られる。

まとめ

同一カテゴリーのアプリケーションを同時に使用する場合、カテゴリーのNotDestoryが必要になります。

今回使用したOrientattionDisplayToos (Ver1.17) 以降可能になりました。

使用したソフトウェア

OrientattionDisplayToos (Ver. 1. 17)

CrystalRotation (Ver1. 13)

CrystalOrientationD (Ver. 2. 04)

PFRotation (Ver. 1. 21)

コンバート、バージョンアップは問い合わせください。