

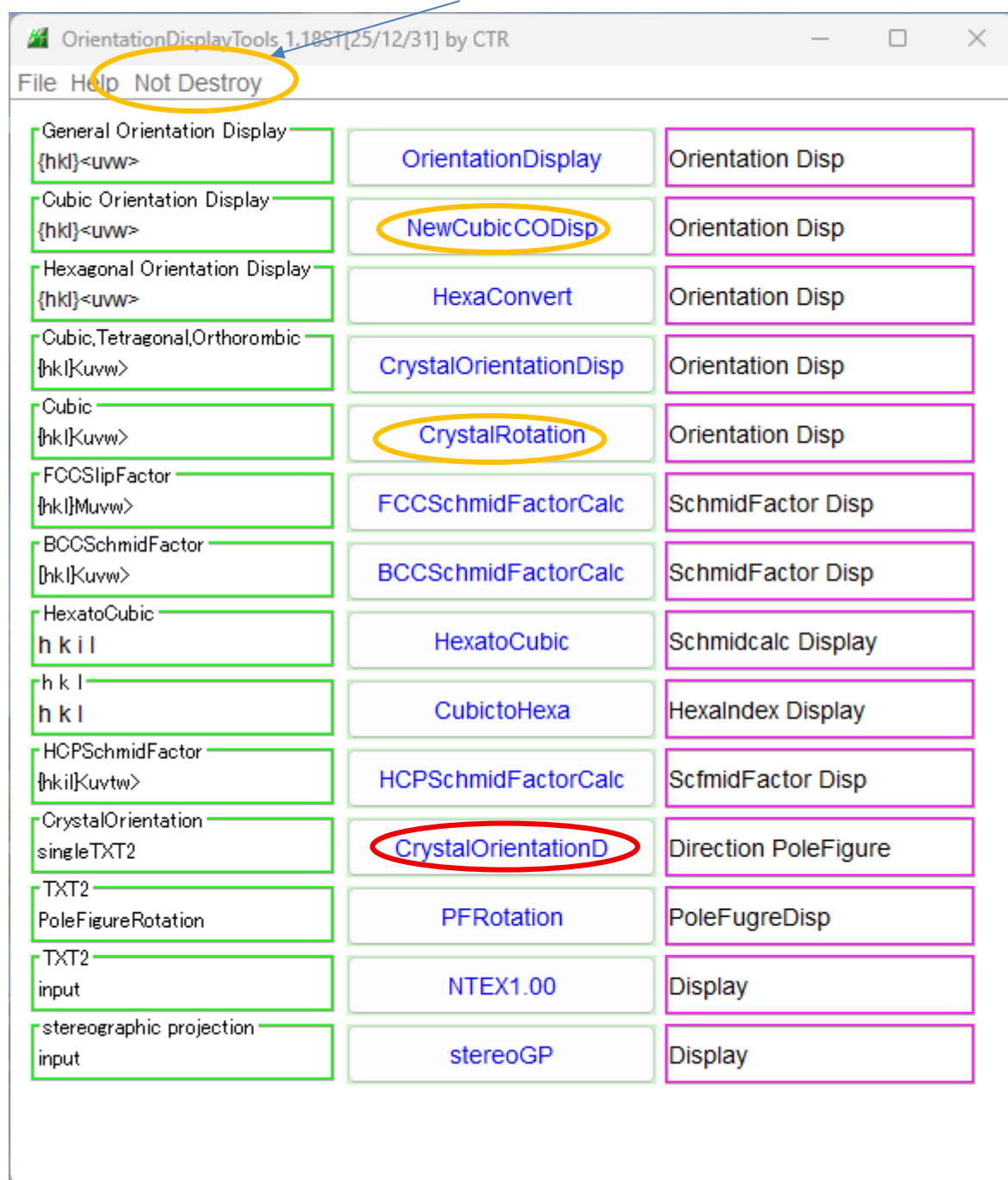
単結晶極点図の方位決定シュミレーション

2025年12月09日

HelperTex Office

概要

CTRソフトウェアで単結晶を扱う主なソフトウェアは以下
このカテゴリソフトウェアの複数起動を可能にする



CrystalOrientationDソフトウェアを紹介します。

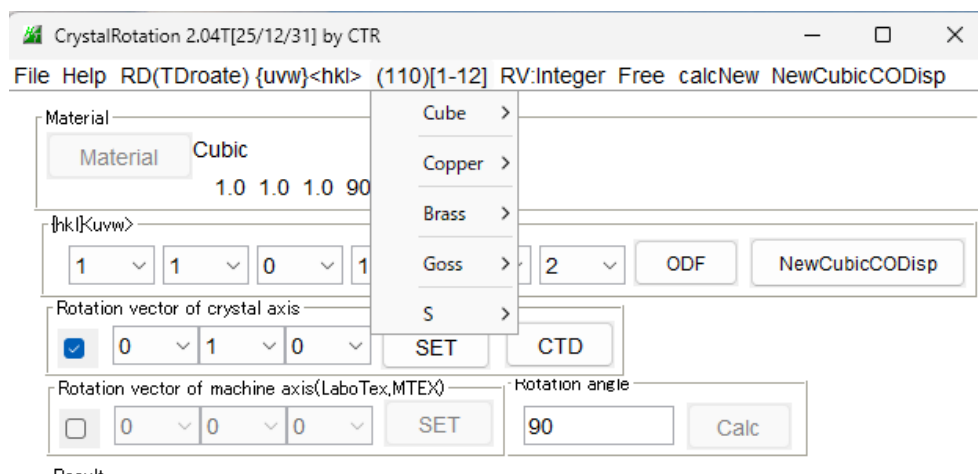
CrystalRotation で単結晶方位を指定

NewCubicCODisp で単結晶極点図を作成

CrystalOrientationD で方位の決定

NewCubicCODisp で方位から単結晶極点図を作成し極点図の確認

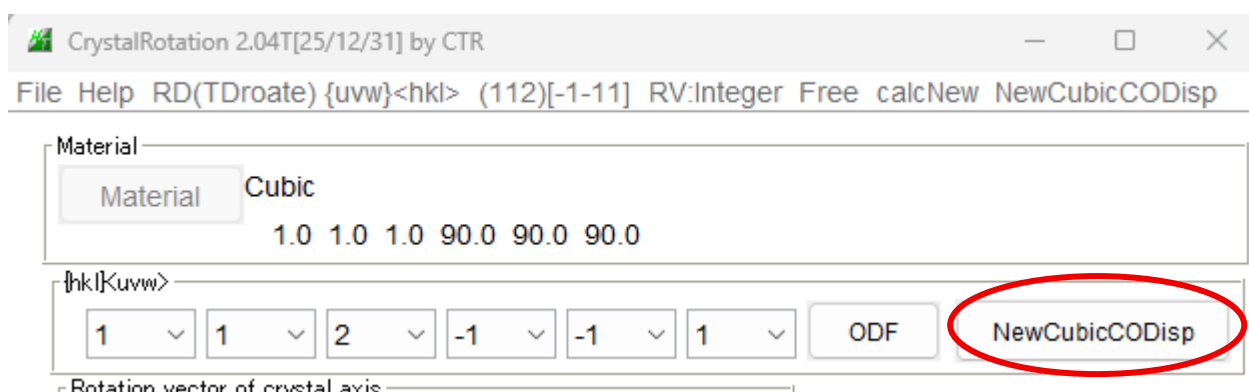
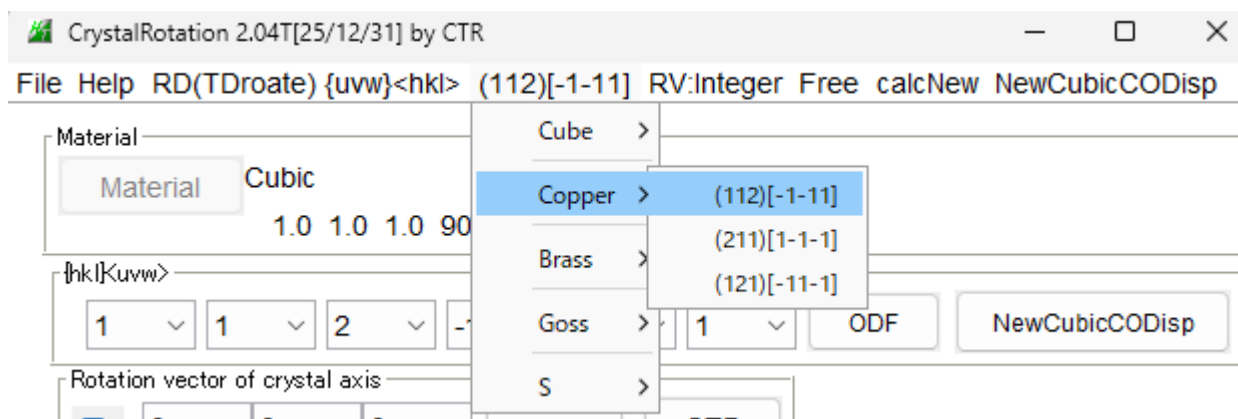
CrystalRotationによる方位指定



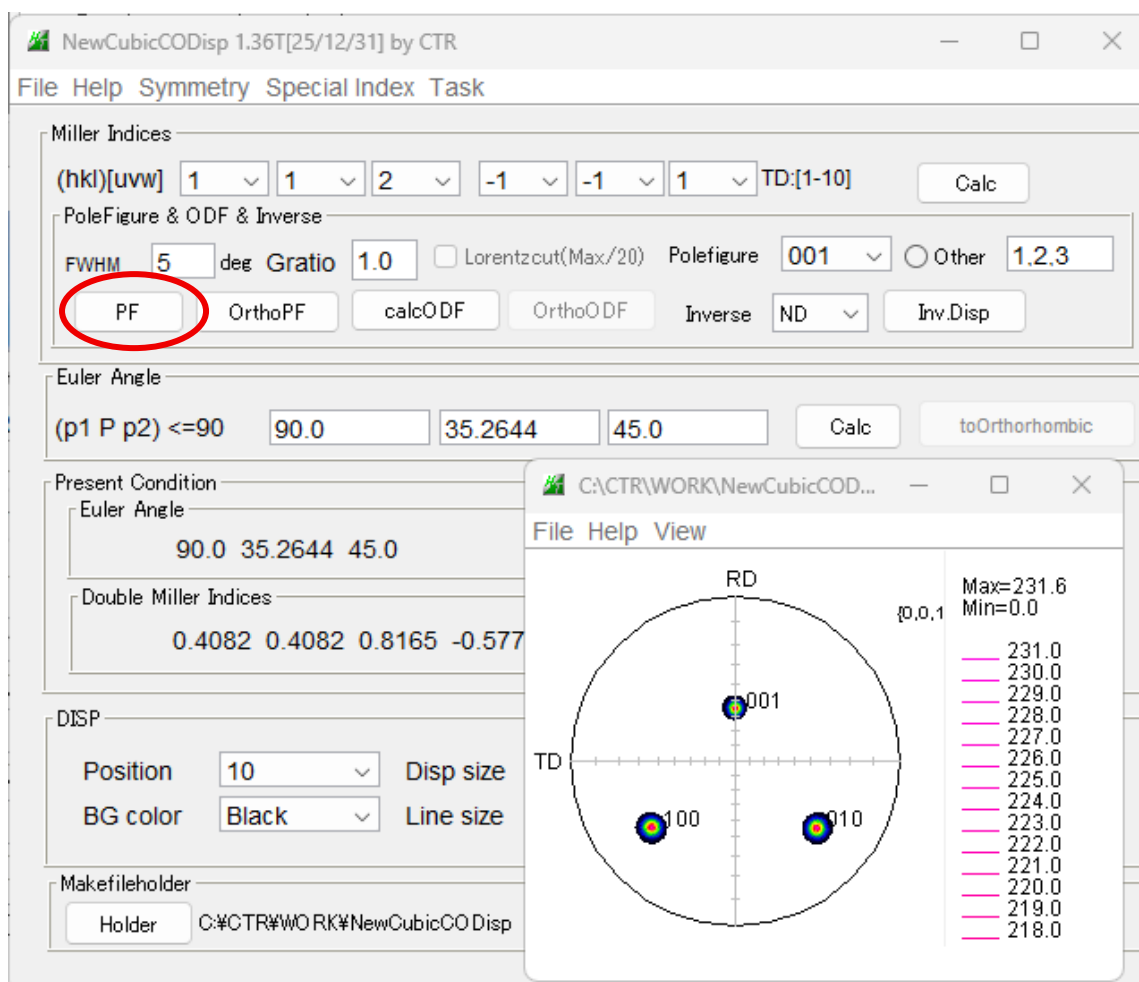
方位に対する単結晶方位の選択



Copper 方位で確認



単結晶極点図作成



CrystalOrientationDで単結晶極点図の方位を決定

予め、選択する単結晶極点図指数の選択

作成された単結晶極点図を選択（単結晶以外は計算できません）

CrystalOrientationD 2.17/T[25/12/31] by CTR

File Help Blind-10 CreatePFStep:5.0 hkl disp=true α0->90 X-Axis:South

PoleFigure

Select file: 001 Center of gravity PoleFigure(TXT2) RD input mode is South. Maxindex 20 ExtentAngle 3.0

C:\CTR\work\NewCubicCODisp#001 dsp 2.TXT

Data input area

Alpha(center=0) 35.017 Xaxis(South: Beta=0)(RD: Beta=180) hkl 1 0 0 to Stack

Reset 65.994 -180.0 -50.987 0 1 0 Stack

Calculation

ND rotate 0.0 degree calc U-matrix notContour CalcPoleFigure FWHM 5 degree

hkl|Kuvw> calc(hkl)<uvw> maxIndex 15 extentAngle 2.0 Check NewCubicCO Disp

Calculate Index

CalcPoleFigure 001 Clear Set Append All

1 0 0
0 1 0
0 0 1
-1 0 0
0 -1 0
0 0 -1

Other(h,k,l) 1,1,1

C:\CTR\work\NewCubicCODisp#001_dsp_2.TXT peaksearchCenter changle=0 phiangle=0(RD=180)

changle	phiangle	Center=90		
35.02	-180.0	54.98	0.0	
65.99	-50.99	24.01	129.013	
65.99	50.99	24.01	230.987	

indexing(Center=0, RD=180->0)

	RD	TD
35.02	180.0	1.0
65.99	180.0	1.0
65.99	180.0	1.0

sqrtdelete: (1 0)

Xaxis(South: Beta=0) ND rotate =0.0

Alpha Beta

35.017 -180.0

65.994 -50.987

U-matrix

-0.57381945840444

-7.02726163023472

0.81898182468015

CalcPoleFigure

Direction

1 0 0

0 1 0

0 0 1

指数付けが行われる

Max=231.6 Min=0.0

231.0
230.0
229.0
228.0
227.0
226.0
225.0
224.0
223.0
222.0
221.0
220.0
219.0
218.0

3057
7556
6667

Max=191.65 Min=0.0

191.0
190.0
189.0
188.0
187.0
186.0
185.0
184.0
183.0
182.0
181.0
180.0
179.0
178.0

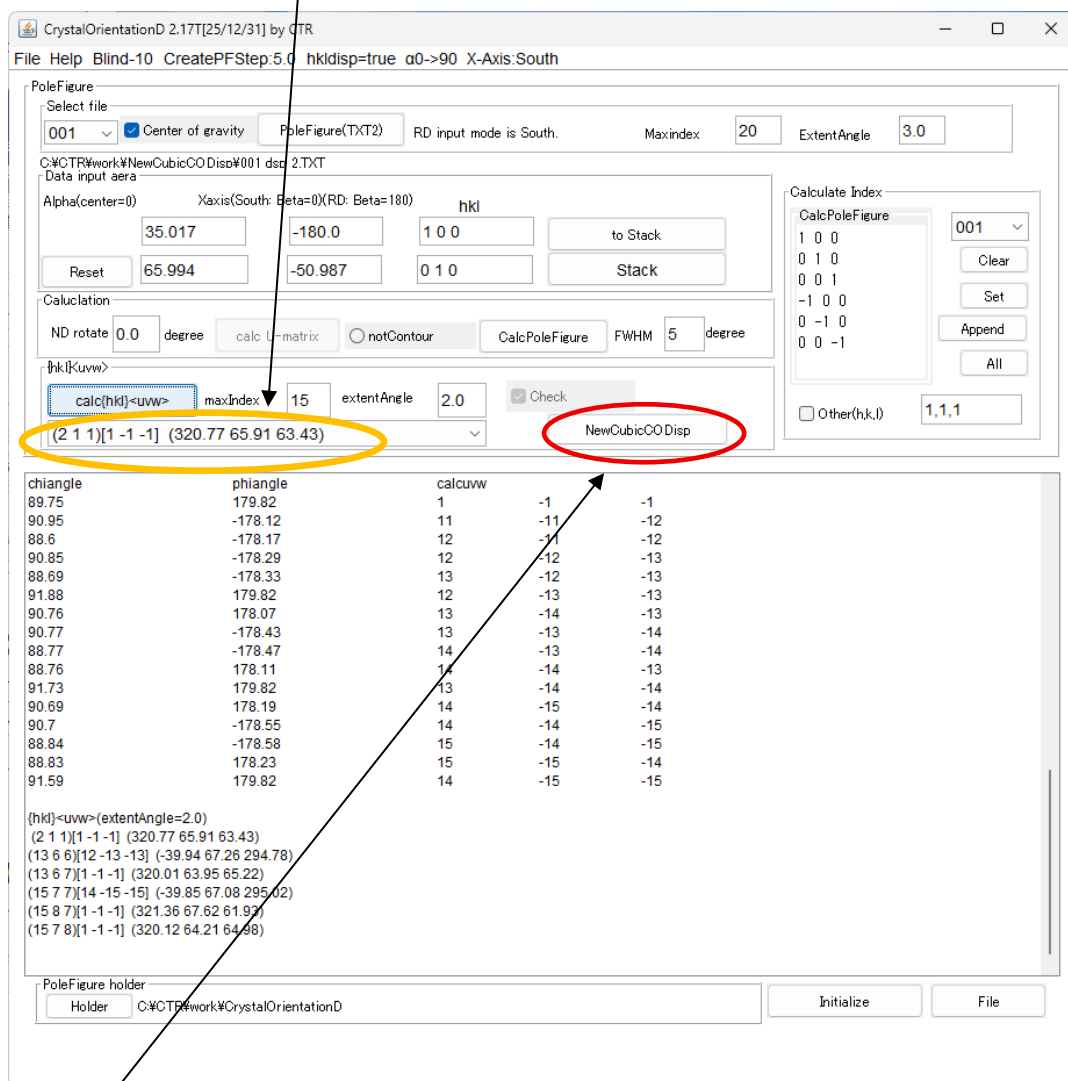
PoleFigure holder

Holder C:\CTR\work\CrystalOrientationD

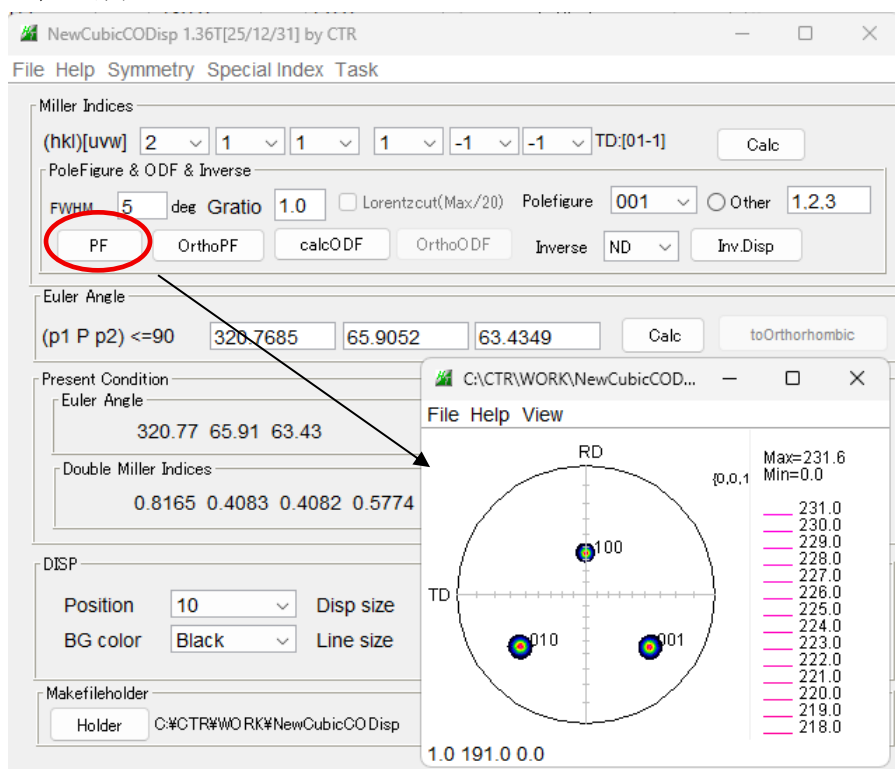
Initialize File

結晶方位の決定

決定した方位を表示



方位の確認



入力された単結晶極点図の一致を確認

逆極点図から方位表示

NewCubicCODisp 1.36T[25/12/31] by CTR

File Help Symmetry Special Index Task

Miller Indices

(hkl)[uvw] TD:[01-1]

PoleFigure & ODF & Inverse

FWHM deg Gratio ☐ Lorentzcut(Max/20) Polefigure ☐ Other

Inverse

