

単結晶の対称性を理解するために

NewCubicCODispに機能追加

2023年12月24日

HelperTex Office

概要

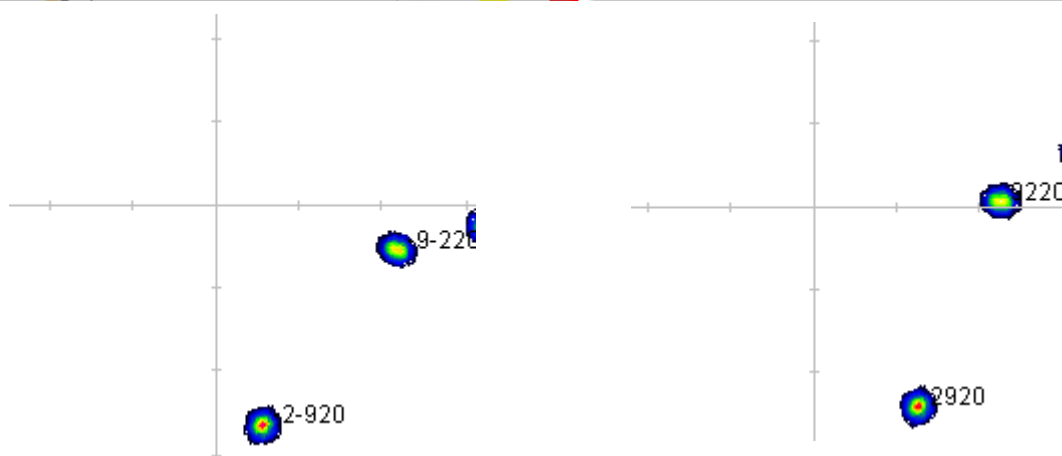
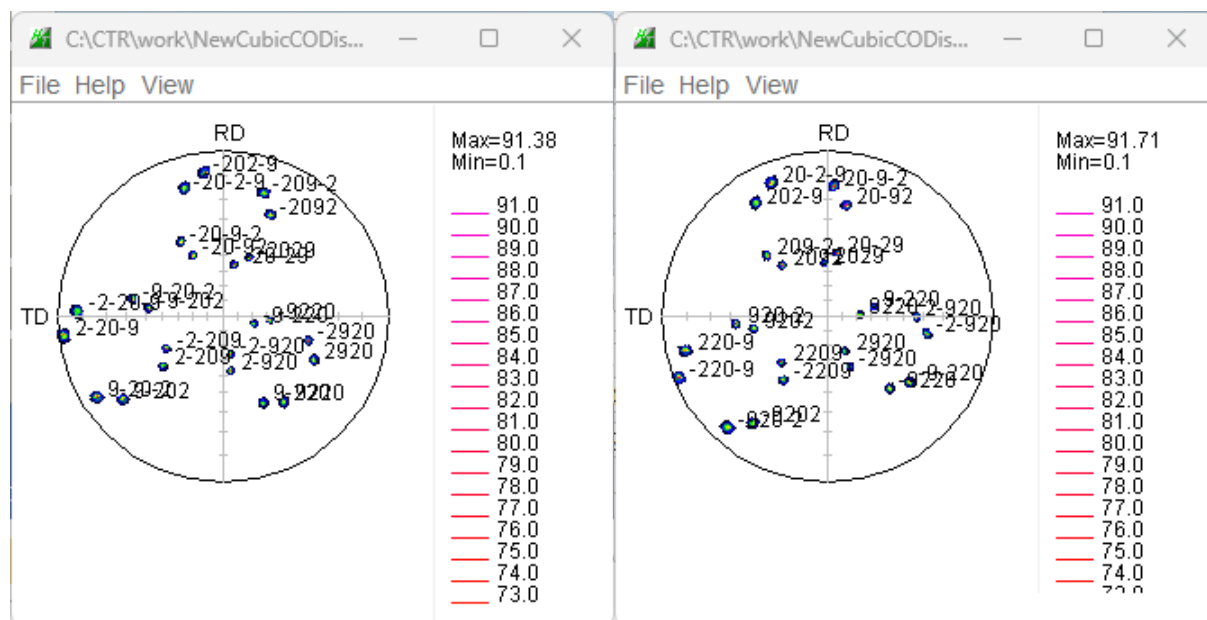
単結晶解析の方位解析ソフトウェアCrystalOrientationDでは、ラウエカメラ、極点測定データからSchmid因子最大方向 $[9\ 2\ 20]$ 切り出し角度の計算を行うが、単結晶の結晶方位の対称性が問題になります。

例えば、測定面が $(-5\ -4\ 7)[-13\ 4\ -7]$ の場合、 $(9\ 2\ 20)$ 極点図は上下種類が考えられます。

true	$(-5\ -4\ 7)[-13\ 4\ -7]$	317.314	42.45	231.34
true	$(5\ 4\ 7)[13\ -4\ -7]$	317.314	42.45	51.34
false	$(5\ 7\ 4)[13\ -7\ -4]$	343.239	65.062	35.538
true	$(4\ 7\ 5)[-4\ -7\ 13]$	90.0	58.194	29.745
false	$(4\ 5\ 7)[-4\ 13\ -7]$	222.686	42.45	38.66
false	$(7\ 4\ 5)[-7\ -4\ 13]$	90.0	58.194	60.255
true	$(7\ 5\ 4)[-7\ 13\ -4]$	196.761	65.062	54.462

True 極点図

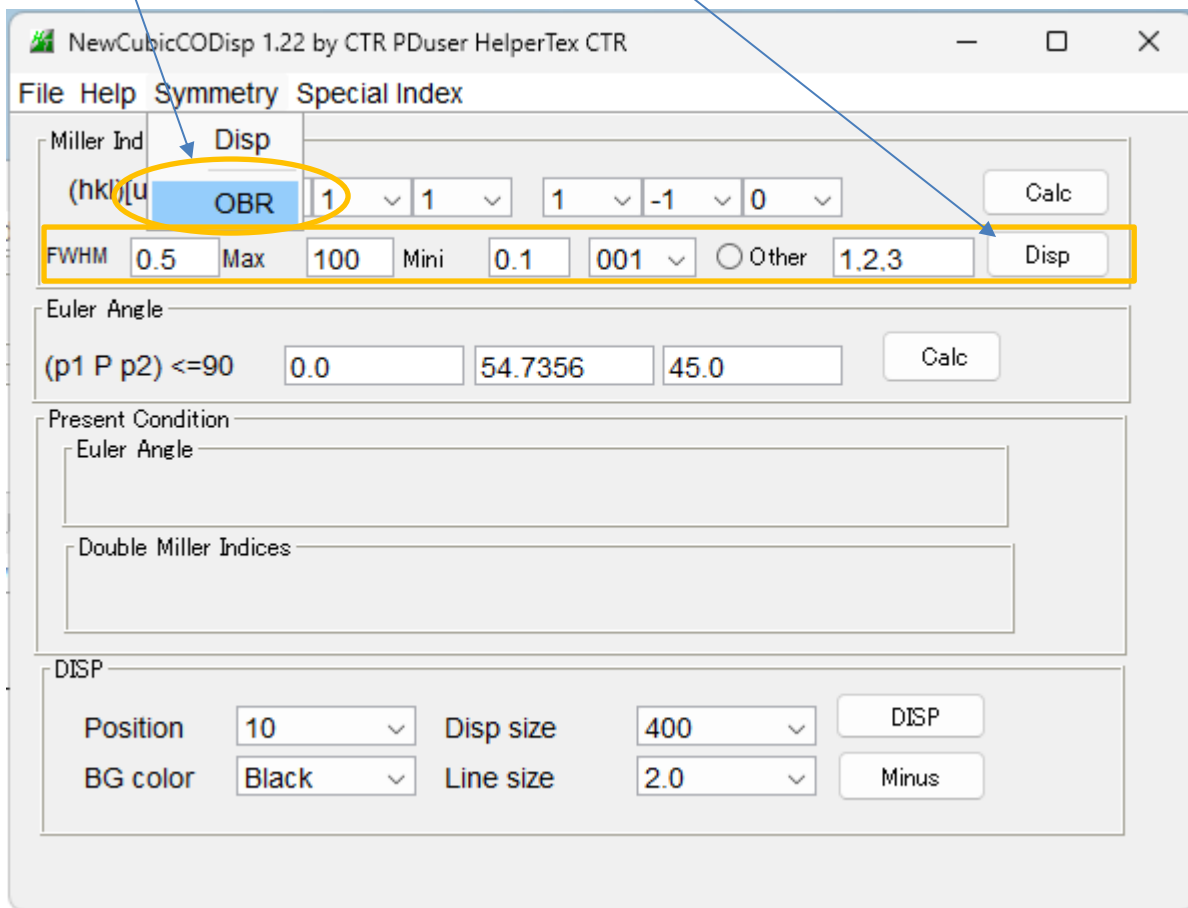
False 極点図



CrystalOrientationDソフトウェア内部で区別が行われているがNewCubicCODispソフトウェアでこのシュミレーションを可能にしました。

追加された機能
対称性評価

極点図表示



OBR : Orientation in Basic Region

対称性評価

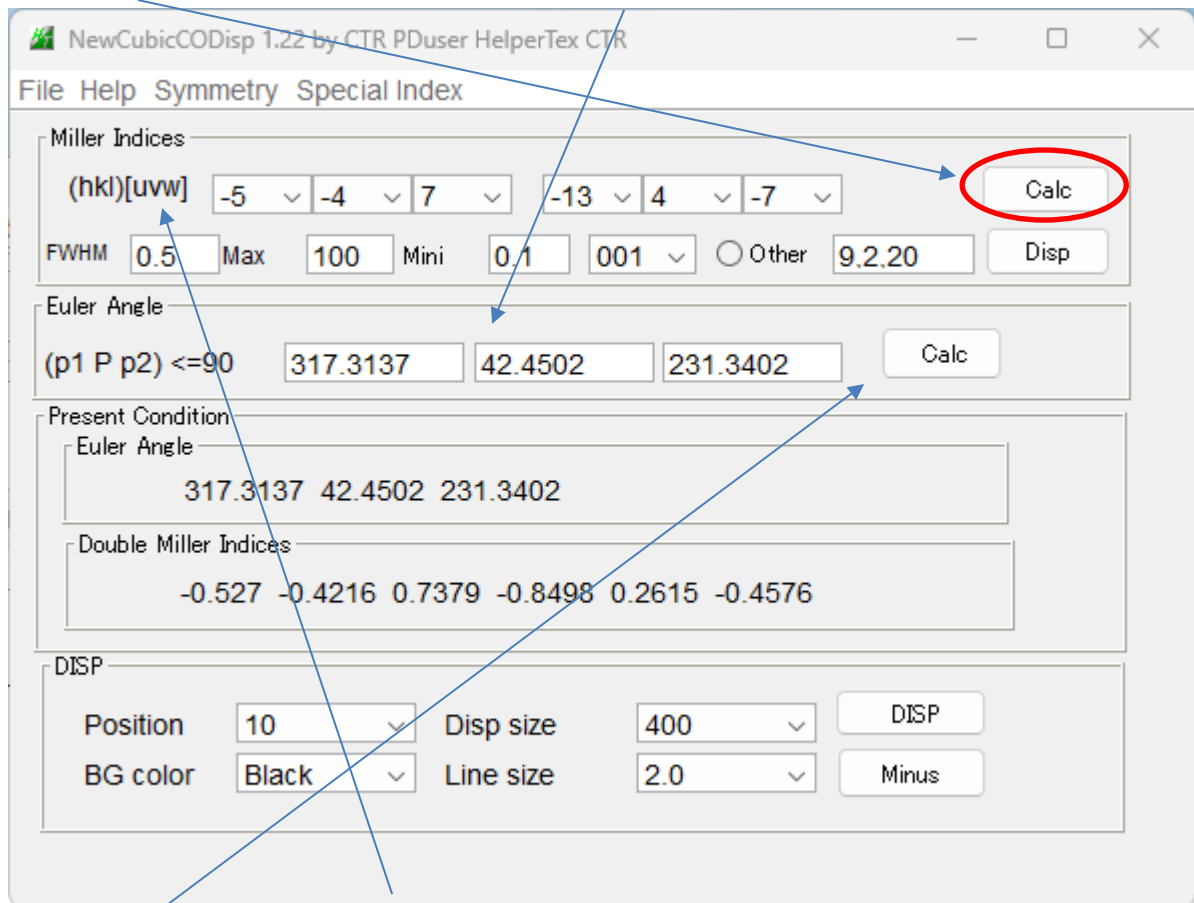
指定した結晶方位 (h k l) [u v w] に対する対称性評価を行う

極点図表示

指定した結晶方位 (h k l) [u v w] から結晶取り付け方位を計算し指定した極点図の描画
CrystalOrientationDソフトウェアでは複数の極点図の重ね合わせが可能であるが、本ソフトウェアでは単独描画

使用例

結晶方位 (h k l) [u v w] から e u l e r 角度計算



e u l e r 角度から結晶方位計算

極点図の描画

極点図の選択

NewCubicCODisp 1.22 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Help Symmetry Special Index

Miller Indices
(hkl)[uvw] -5 -4 7 -13 4 -7 Calc

FWHM 0.5 Max 100 Mini 0.1 001 Other 9.2,20 Disp

Euler Angle
(p1 P p2) <=90 317.3137 42.4502 231.3402 Calc

Present Condition
Euler Angle
317.3137 42.4502 231.3402

Double Miller Indices
-0.527 -0.4216 0.7379 -0.8498 0.2615 -0.4576

DISP
Position 10 Disp size 400 DISP
BG color Black Line size 2.0 Minus

選択以外の入力（指数には区切りが必要）カンマ、あるいはスペース

NewCubicCODisp 1.22 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Help Symmetry Special Index

Miller Indices
(hkl)[uvw] -5 -4 7 -13 4 -7 Calc

FWHM 0.5 Max 100 Mini 0.1 001 Other 9.2,20 Disp

Euler Angle
(p1 P p2) <=90 317.3137 42.4502 231.3402 Calc

Present Condition
Euler Angle
317.3137 42.4502 231.3402

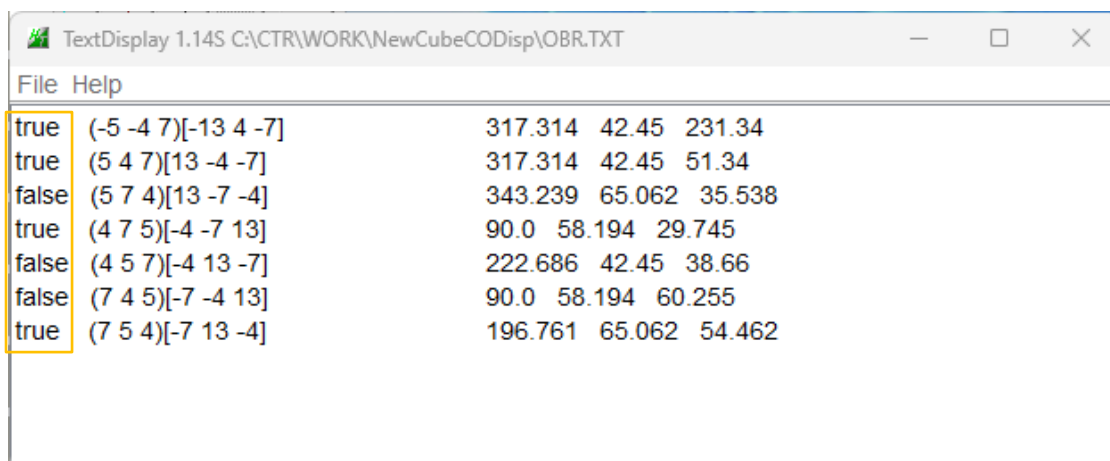
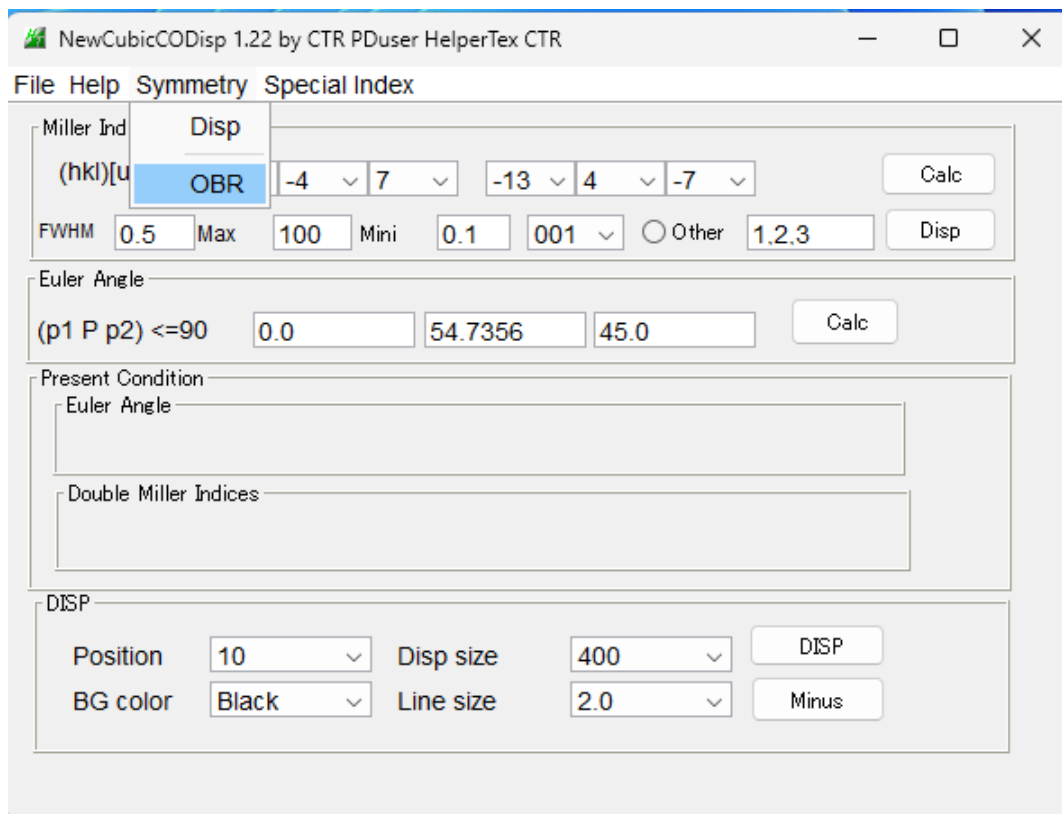
Double Miller Indices
-0.527 -0.4216 0.7379 -0.8498 0.2615 -0.4576

DISP
Position 10 Disp size 400 DISP
BG color Black Line size 2.0 Minus

計算時間が長い

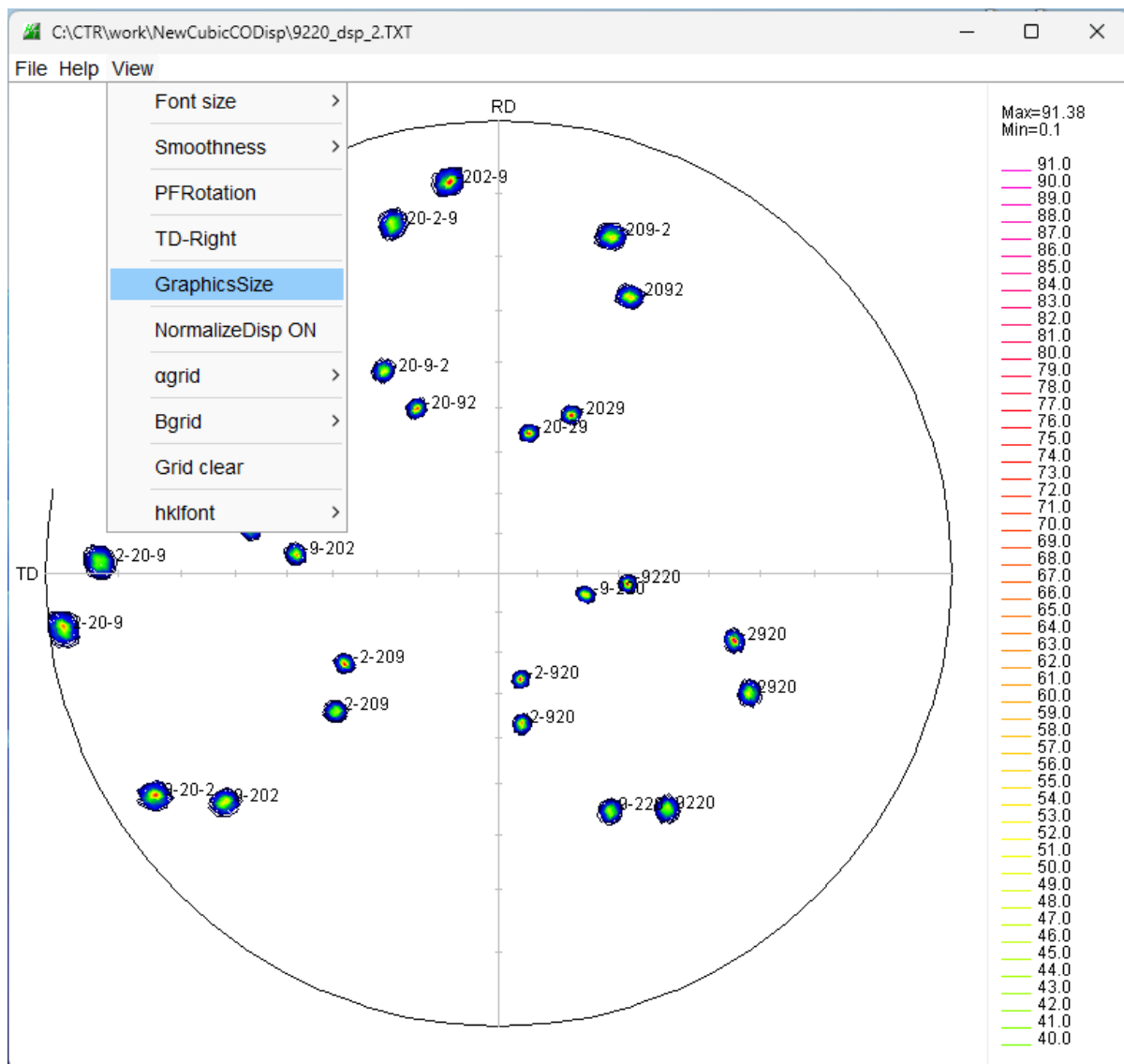
表示した極点図は C:\CTR\work\newCubciCODisp 以下に保存されるが
次回起動時に削除される

対称性評価

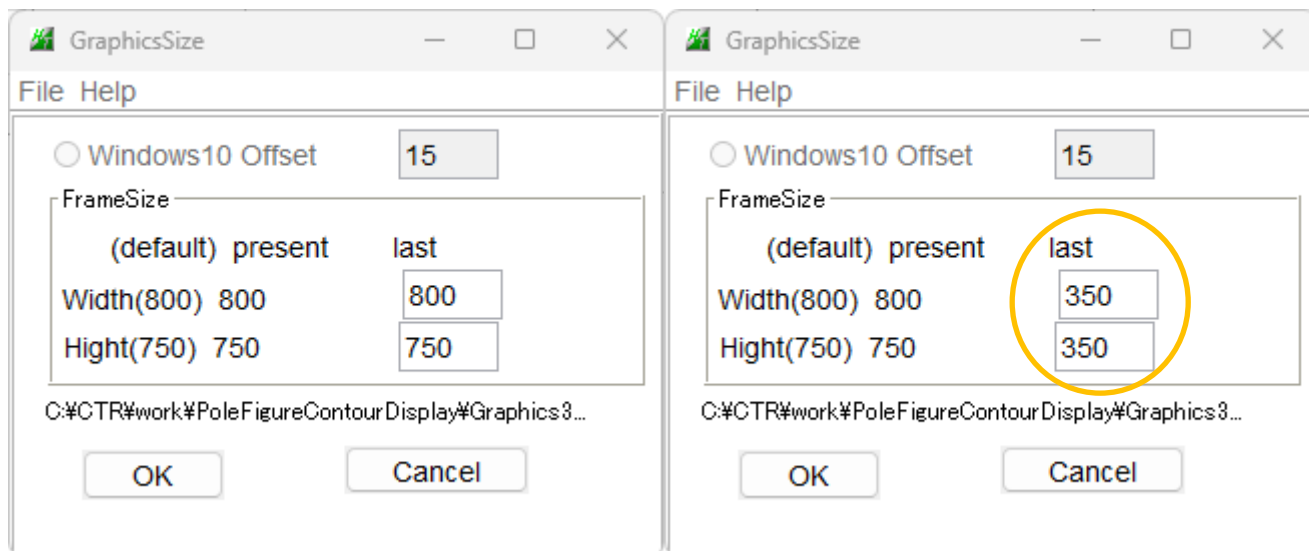


(h k l) にマイナスがある場合、2段目の変換が行われ、全て2段目との比較評価が行われる

表示極点図

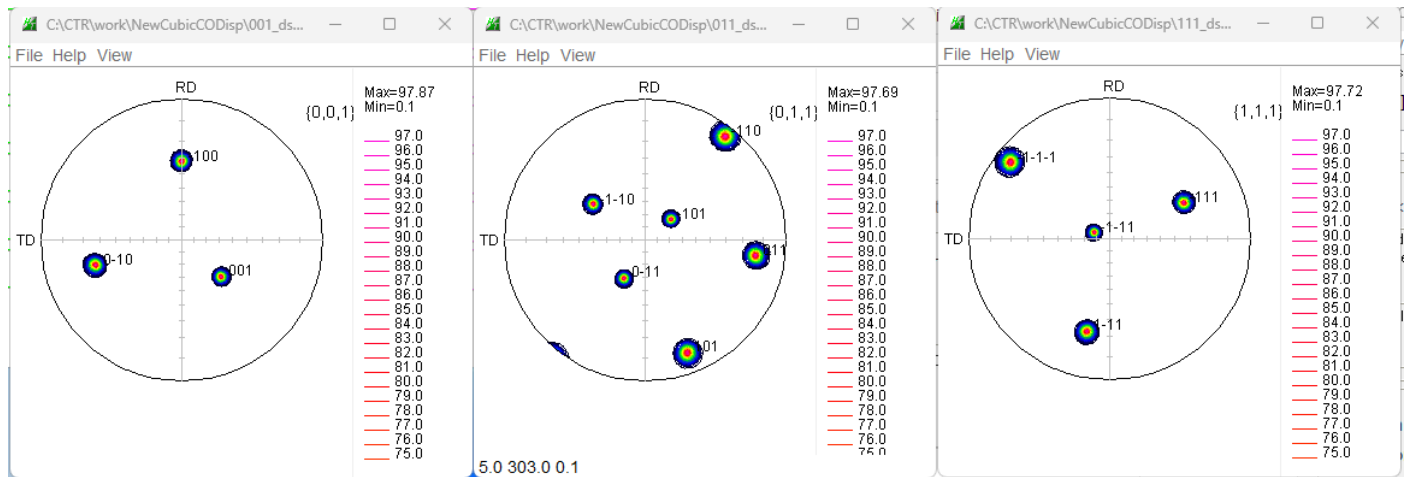


サイズ変更が可能



変更されたサイズで以降表示される

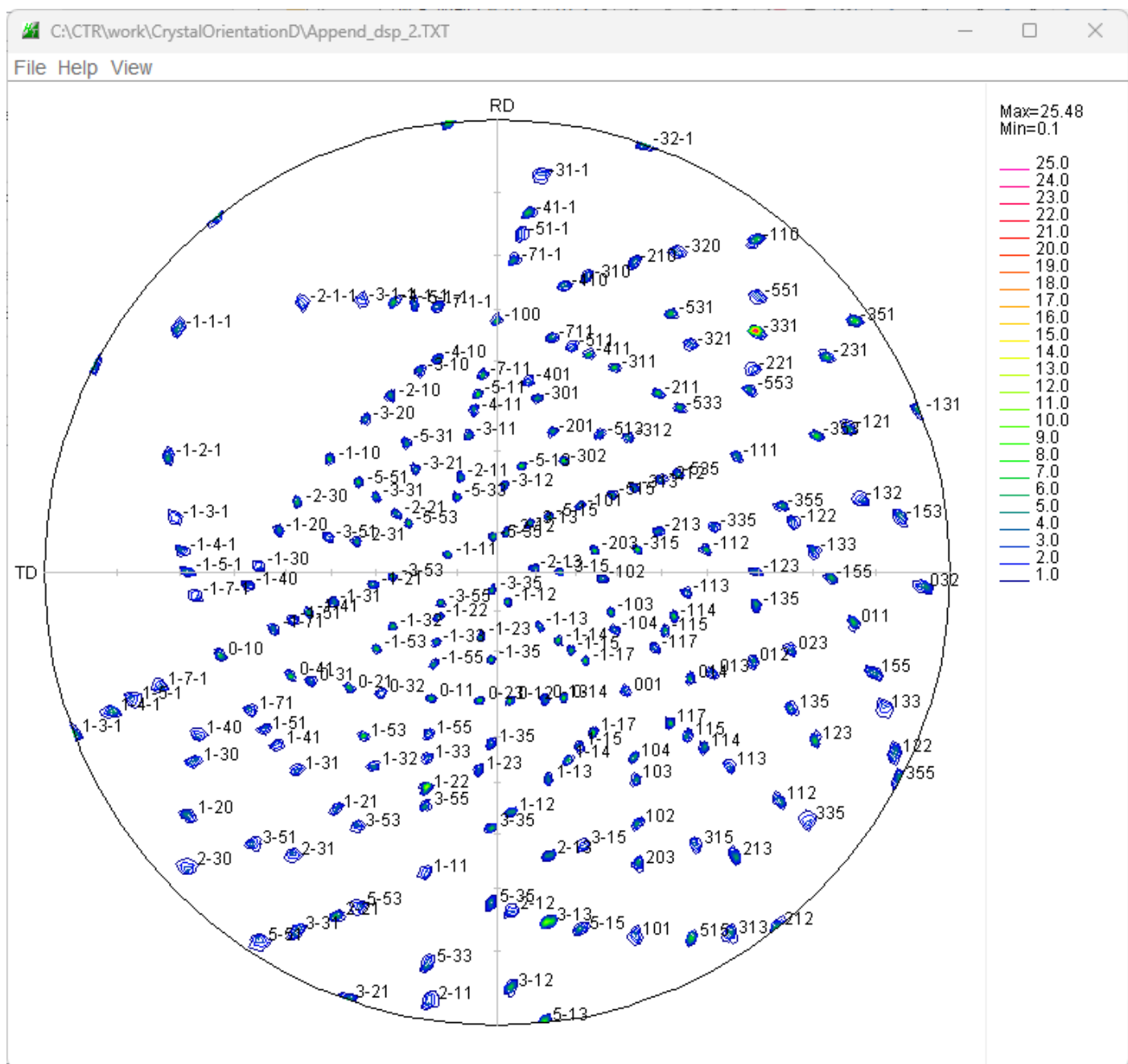
複数極点図表示



CrystalOrientationDソフトウェアによるAppend表示



多数表示



CrystalOrientationDの機能説明

CrystalOrientationDでは、対称性に変換し表示しています。

以下はSi単結晶の極点データから方位解析を行った結果です。

Triclinicで、(401)[-3-4]が検出されています。

指定された対称性に合致した方位が表示されています。