

X線回折ハンドブック

リガク標準ステレオ投影図を計算する

2023年12月07日

HelperTex Office

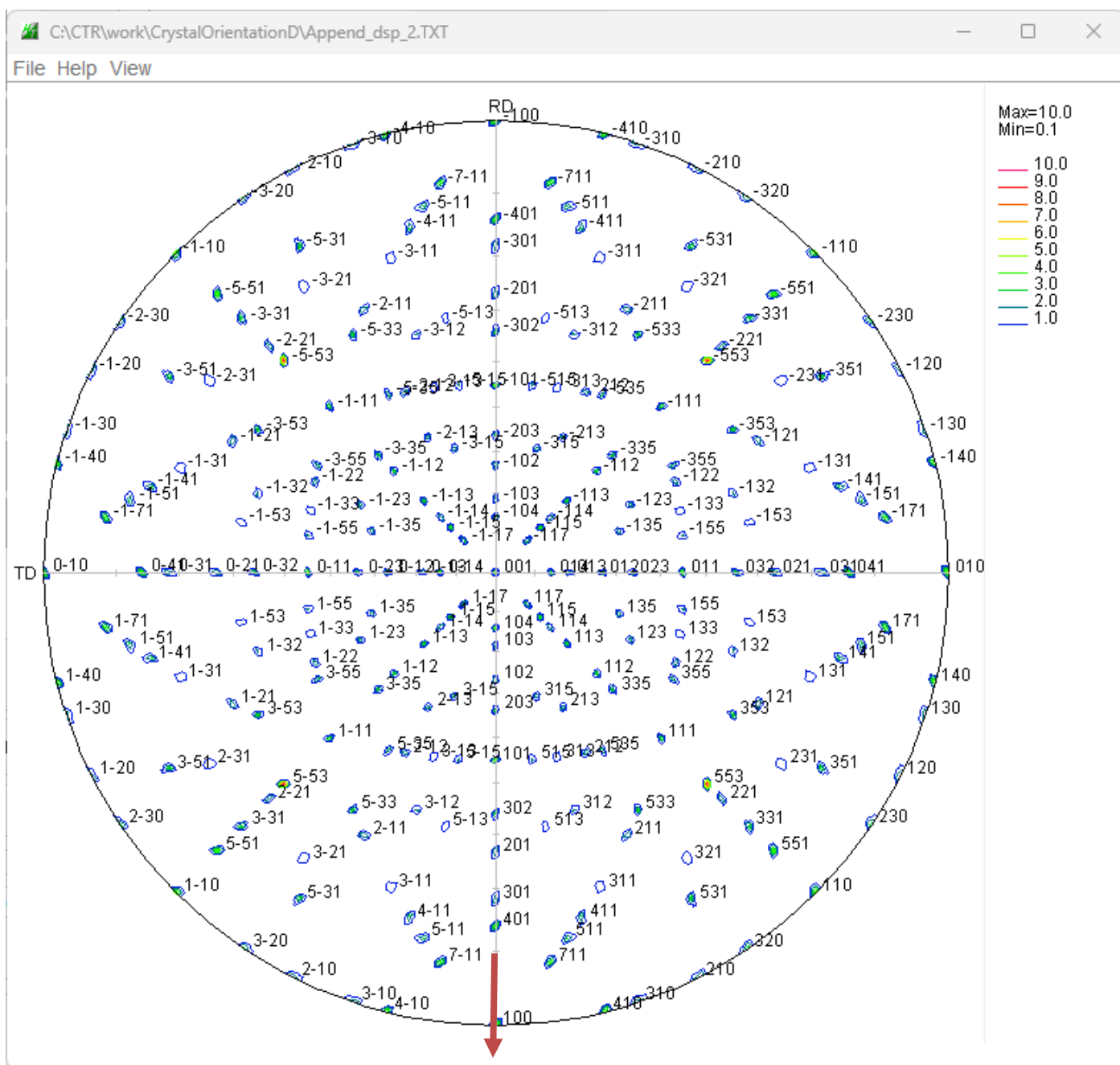
概要

リガクから支給されている [X線回折ハンドブック] には付録として標準ステレオ投影図が掲載されている。立方晶 (001), (110), (111), (112), (012) が収録されている。

この図と同様の図を CrystalOrientationD ソフトウェアで描画できる。

しかし指数のマイナス表示は困難であるが、(123), (013), (113) もサポートされている。

元々、単結晶の方位解析を目的に制作されているが任意方位の軸立ての必要性からステレオ投影図がサポートされた。以下の図が表示される。コンピュータの性能にも関係するが30秒程度で表示される。



X軸(beta=0)

ソフトウェア (CrystalOrientationD)

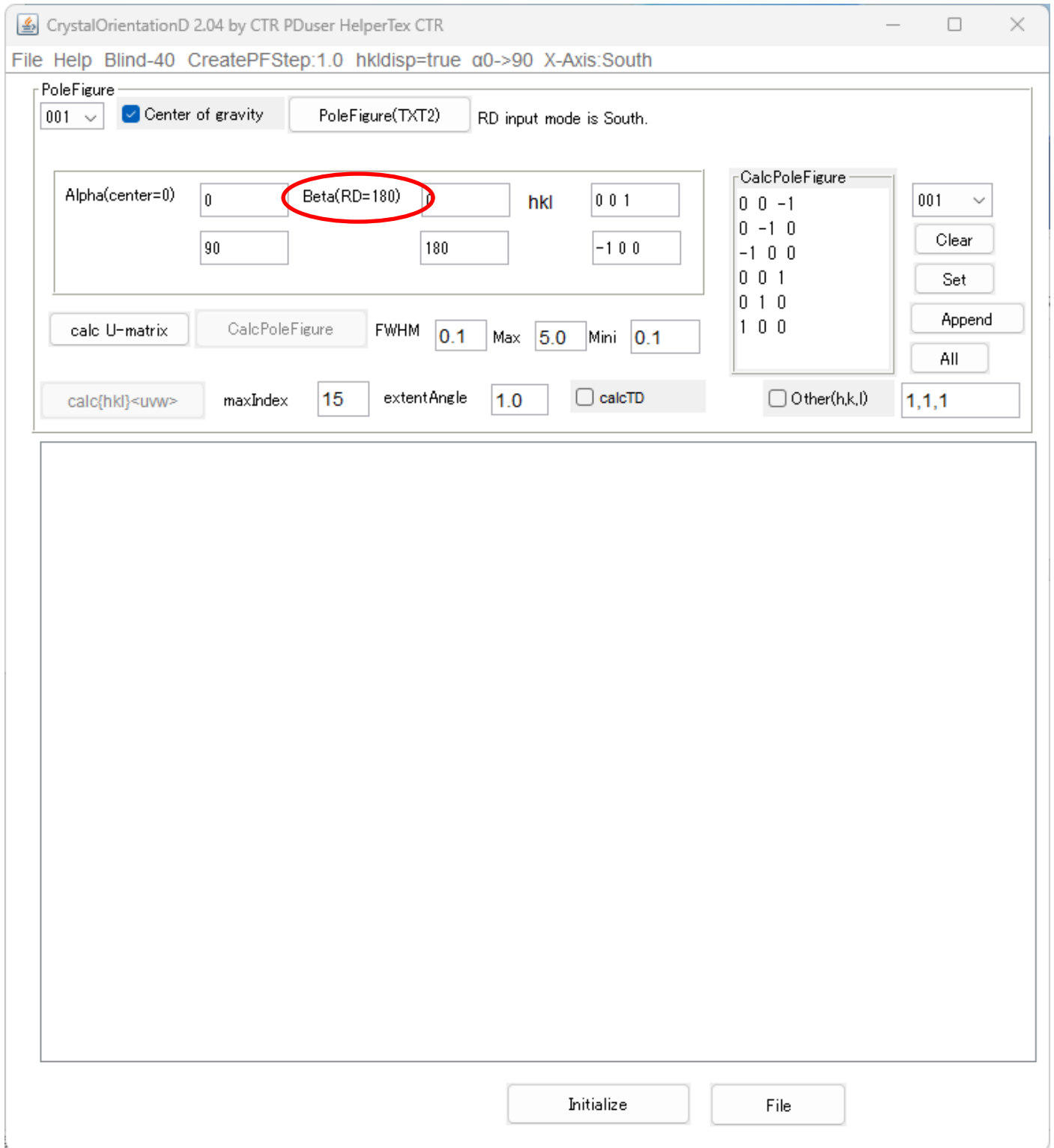
入力

指数選択

極点図選択 (RD方向はNorth)

ラウエカメラデータ入力 (RD方向East)

RASCOデータ入力 (RD方向South)

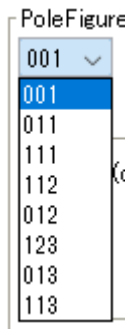


機能

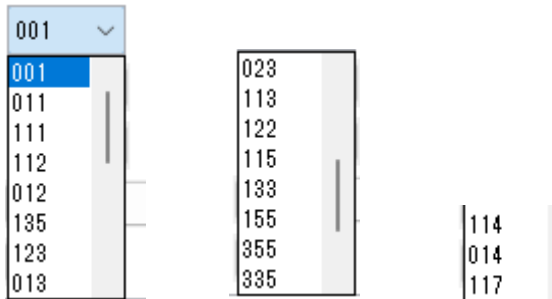
{h k l} <u v w>計算

任意方位の極点図描画 (任意方位切り出し角度計算が可能)

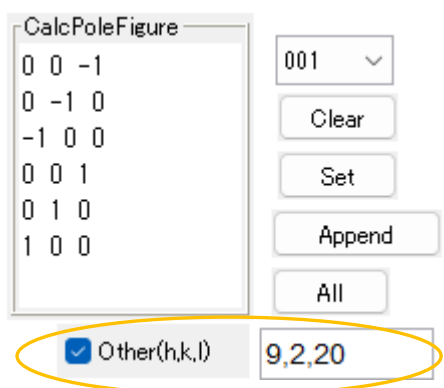
表示可能なステレオ投影図



計算可能選択指数



手入力指定で任意指数

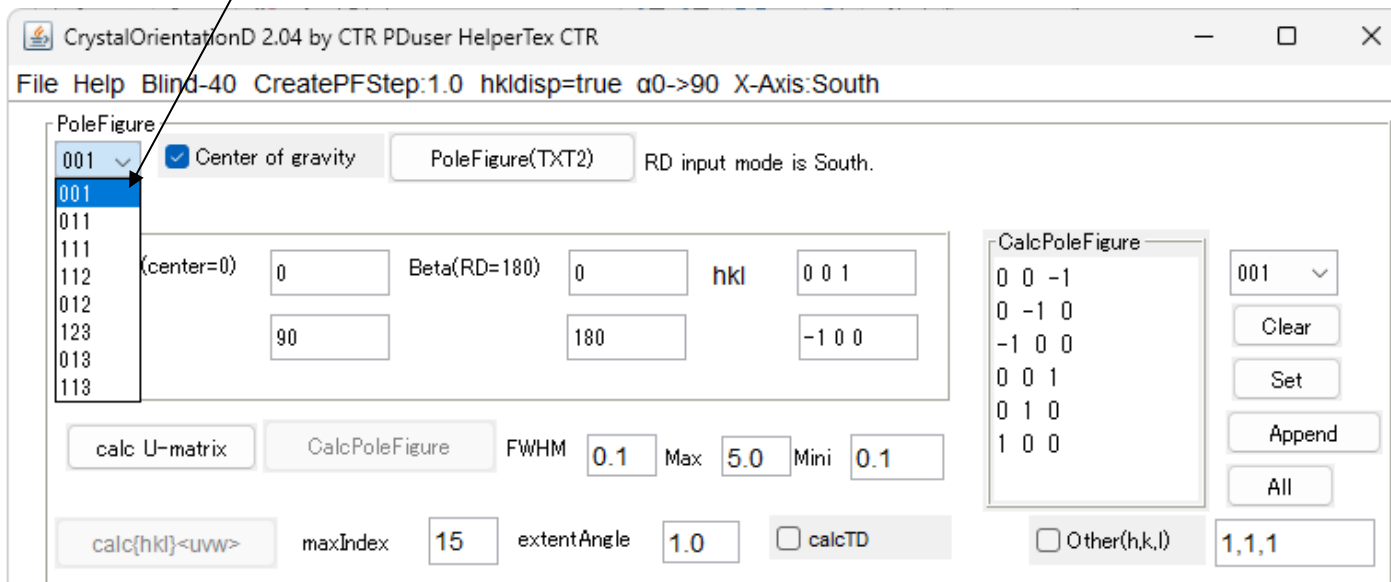


標準ステレオ投影図描画はAllを選択

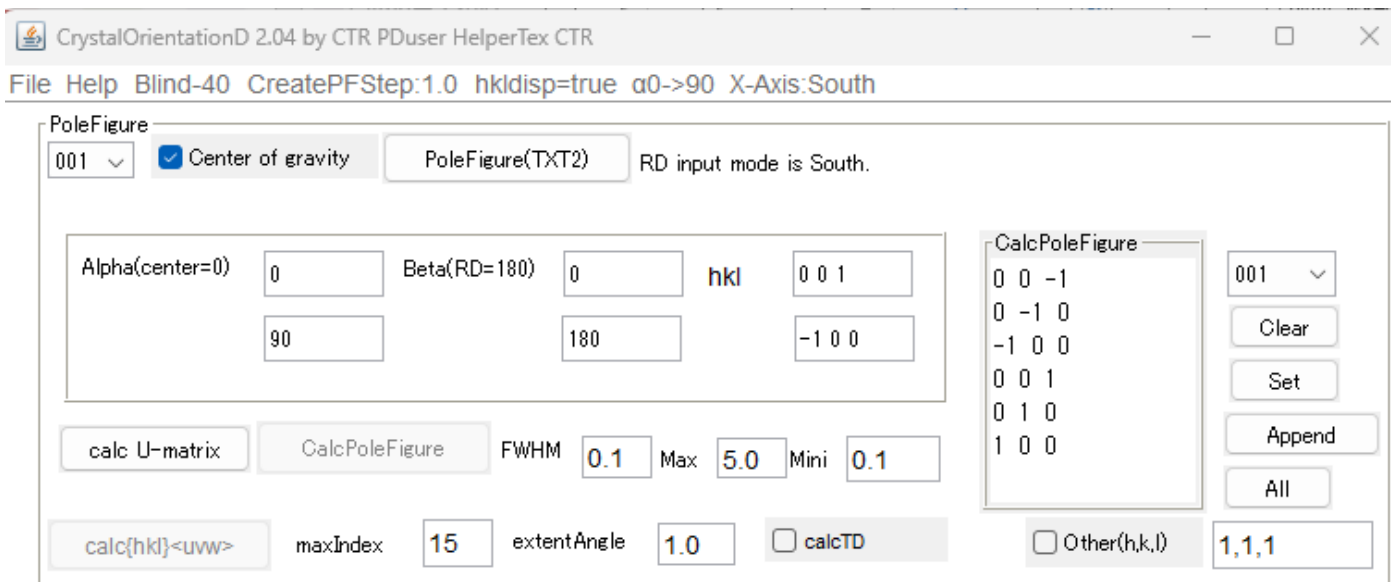
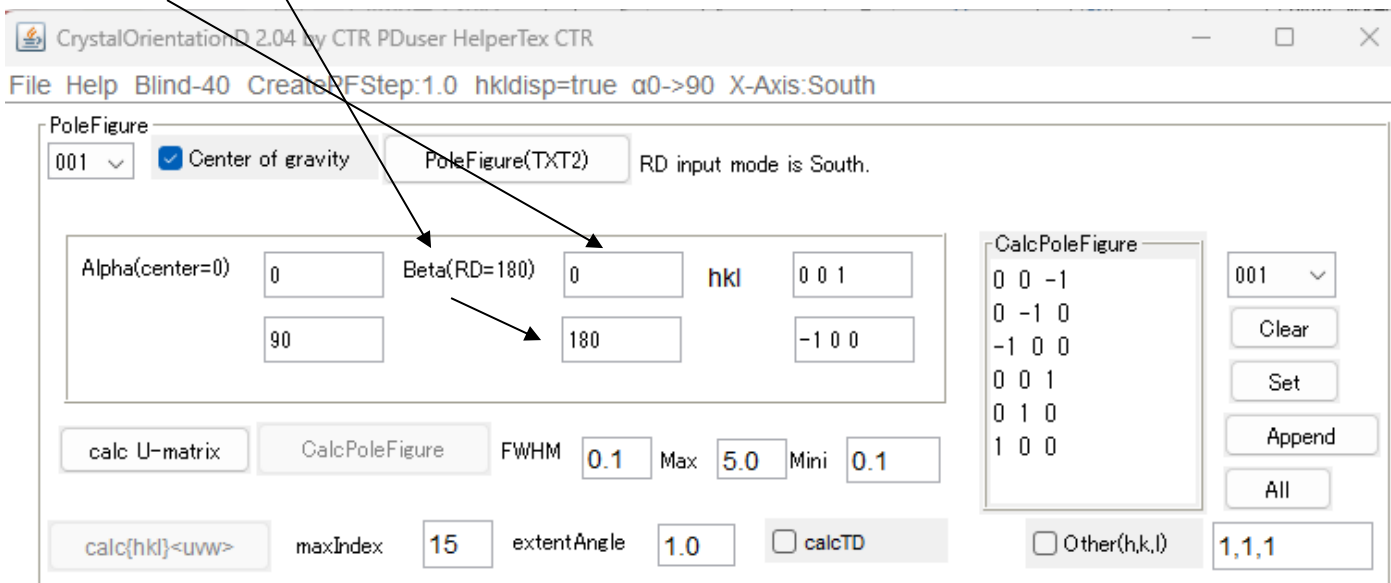
更にOtherで追加をAppend可能

(0 0 1) 標準ステレオ投影図描画

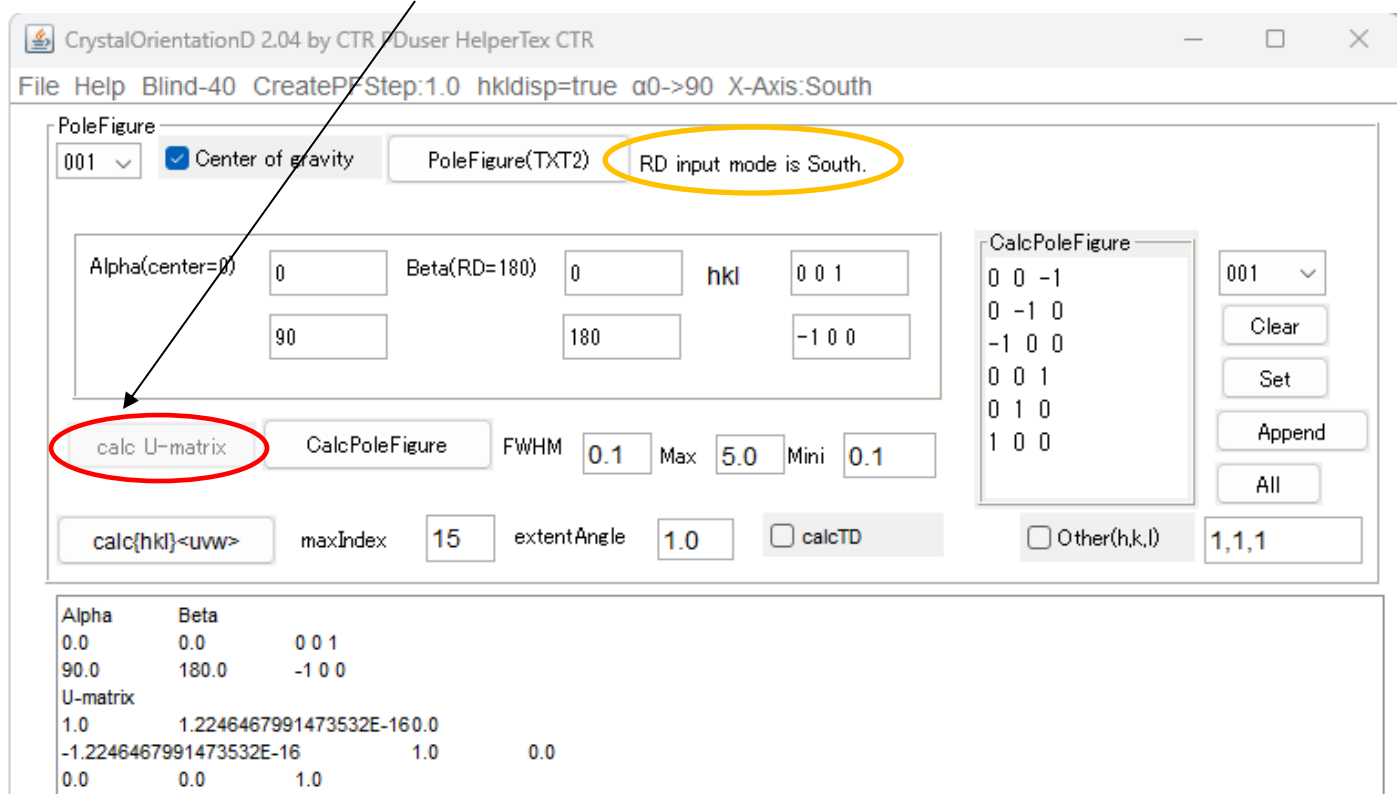
指数0 0 1を選択



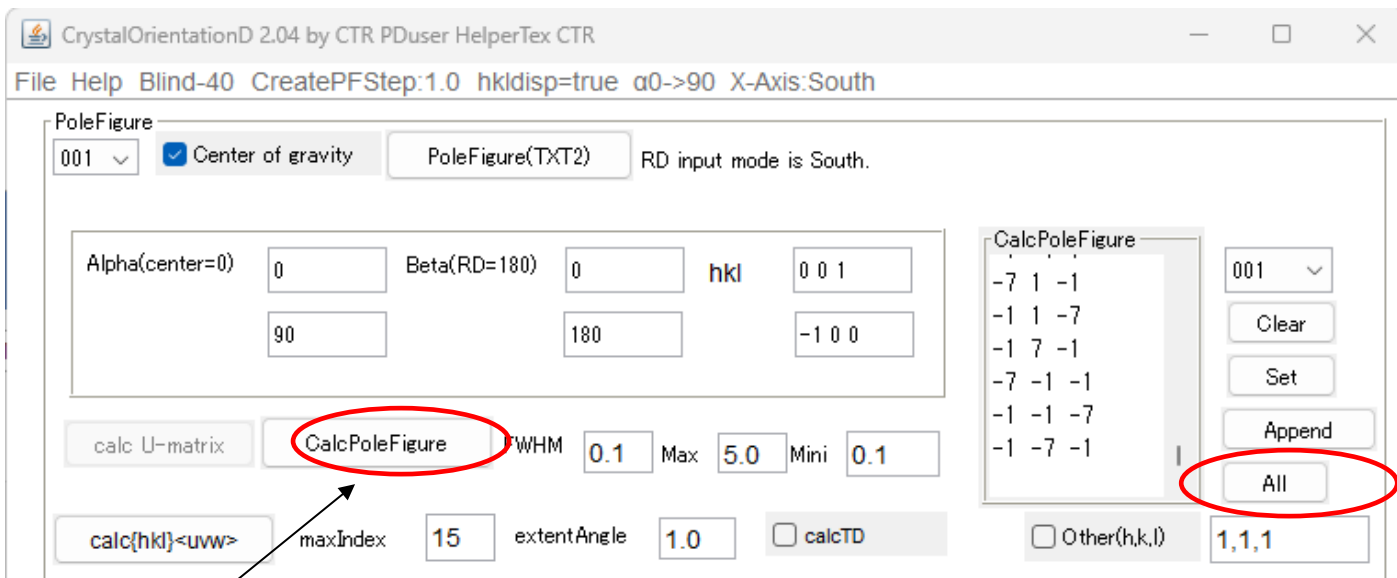
ND 方向と RD 方向が表示される



取付Matrixの計算 (calcMatrixは一度計算すると、非アクティブになります)



計算する指数を指定 (A 1 1 を指定)



ステレオ投影図の表示

以上で表示されます。

S c h m i d 因子最大値 (9 , 2 , 2 0) 方位の切り出し

CrystalOrientationD 2.04 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 0 1
 90 180 -1 0 0

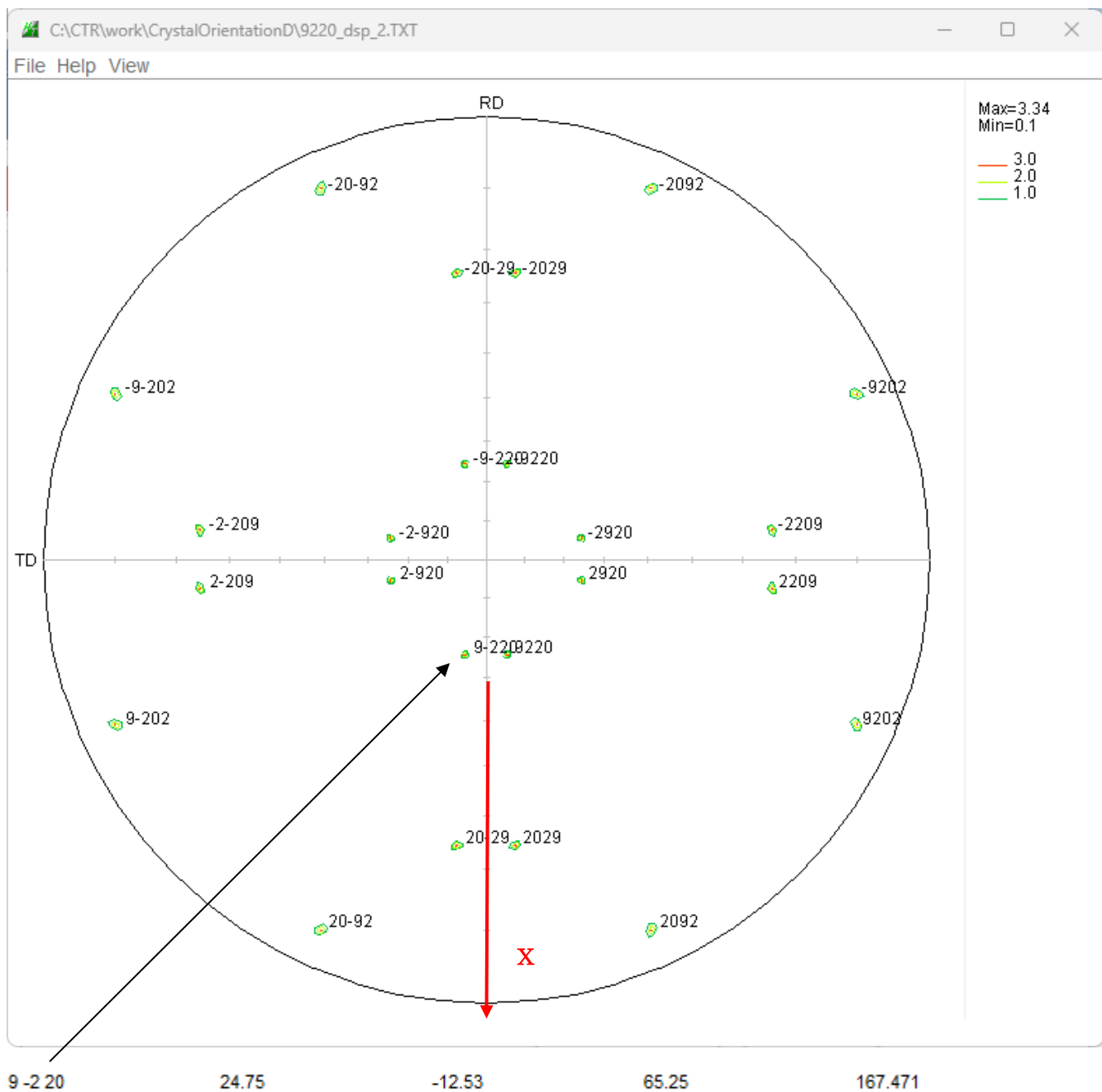
Calc PoleFigure
 9 2 20
 9 20 2
 2 20 9
 2 9 20
 20 9 2
 20 2 9

001
 Clear
Set
 Append
 All

calc U-matrix **CalcPoleFigure** FWHM 0.1 Max 5.0 Mini 0.1

calc{hkl}<uvw> maxIndex 15 extentAngle 1.0 calcTD Other(h,k,l) 9,2,20

9 -2 20 24.75 -12.53 65.25 167.471



{111} <-1-12> と TD との関係

CrystalOrientationD 2.05 by CTR PDuser HelperTex CTR

File Help Blind-40 CreatePFStep:1.0 hkldisp=true α0->90 X-Axis:South

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

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

CalcPoleFigure
 111
 -1 1 -1
 -1 1 1
 1 -1 -1
 1 -1 1
 1 1 -1
 1 1 1

calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM 0.1 Max 100 Mini 0.1

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

{hkl}<uvw>(extentAngle=1.0)
 (1 1 1)[-1 -1 2] TD :[1 -1 0]
 (1 1 1)[1 1 -2] TD :[-1 1 0]

