

Tetragonal, Orthorhombic, Hexagonalの
stereo 投影図による直交座標変換確認

2025年01月27日

HelperTex Office

1. 概要

直交座標系のTetragonal、OrthorhombicはCubicに変換可能である。
又、Hexagonalの直交座標系へ変換も可能である。
この事をステレオ投影図で確認を行う。

格子定数を (a, b, c, α , β , γ) で表現し、方位を (h k l) [u v w]

Cubicの方位を (HKL) [UVW] とした場合

Tetragonal Orthorhombicは

$$H = h / a$$

$$K = k / b$$

$$L = l / c$$

$$U = u * a$$

$$V = v * b$$

$$W = w * c$$

Hexagonal (h k i l) [u v t w] とした場合

$$H = h * 2 / \sqrt{3} + h / \sqrt{3}$$

$$K = k$$

$$L = l * (a / c)$$

$$U = u * \sqrt{3} + v * \sqrt{3} / 2$$

$$V = u * 3 / 2$$

$$W = w * (c / a)$$

2. OrthorhombicとCubic比較

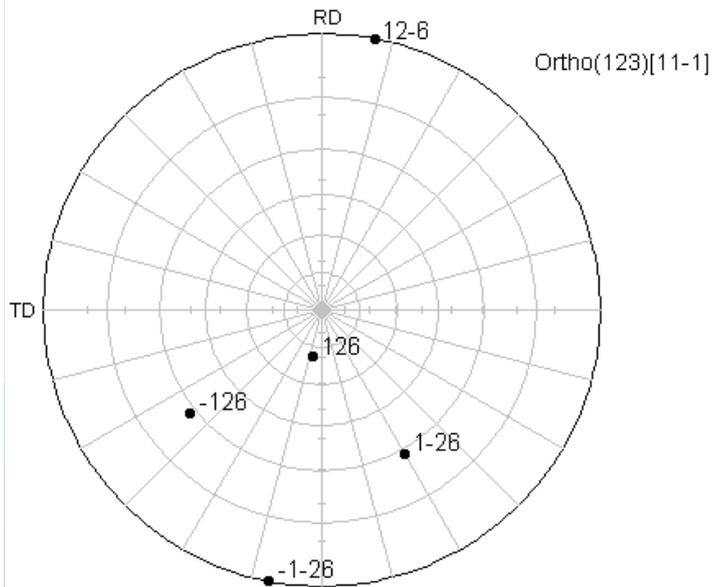
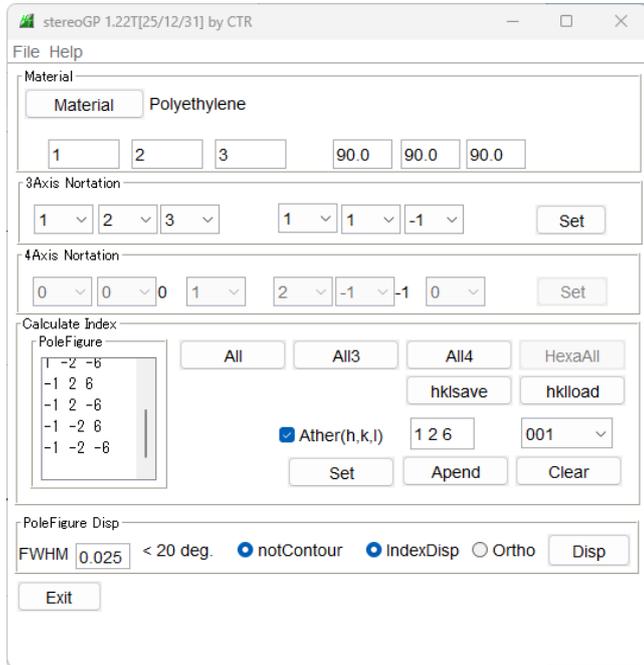
計算を簡単にするために格子定数 w_0 (1, 2, 3, 90, 90, 90)とする。

方位を(1 2 3) [1 1 -1]とする。

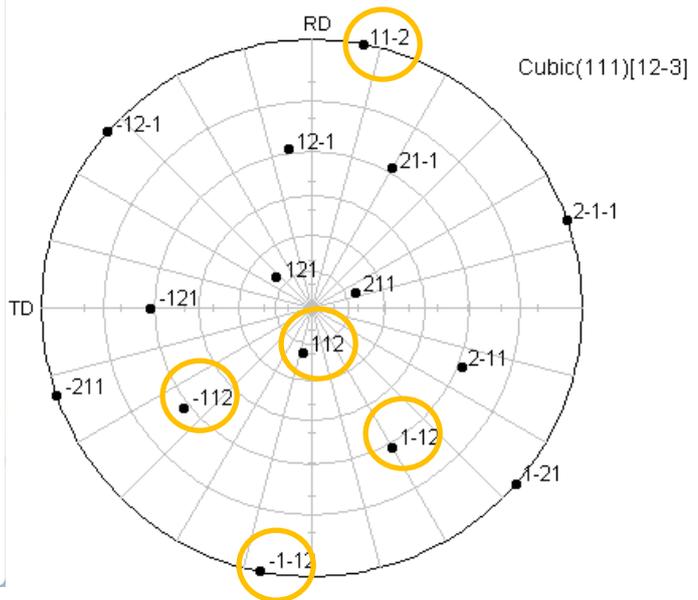
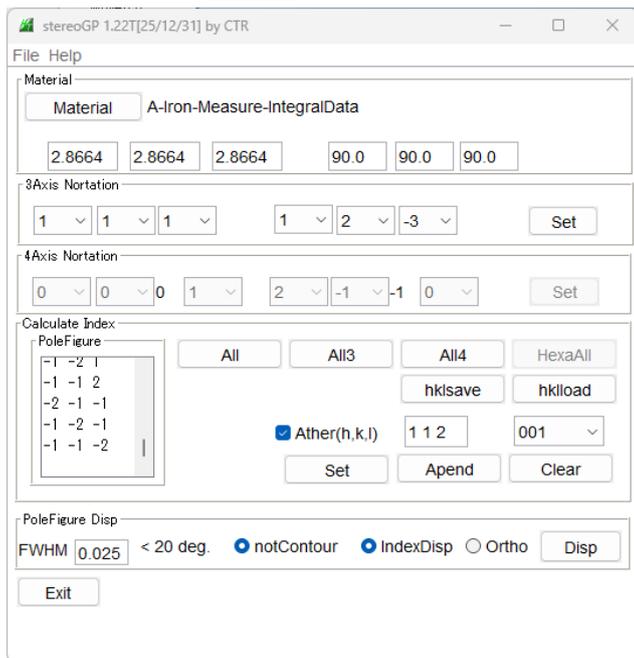
Cubicに変換すると(1 1 1) [1 2 -3]である。

ステレオ投影として(1 2 6) \rightarrow Cubicでは(1 1 2)になります。

Orthorhombic



Cubic



OrthorhombicのCubic変換が来ています。

3. TetragonalとCubic比較

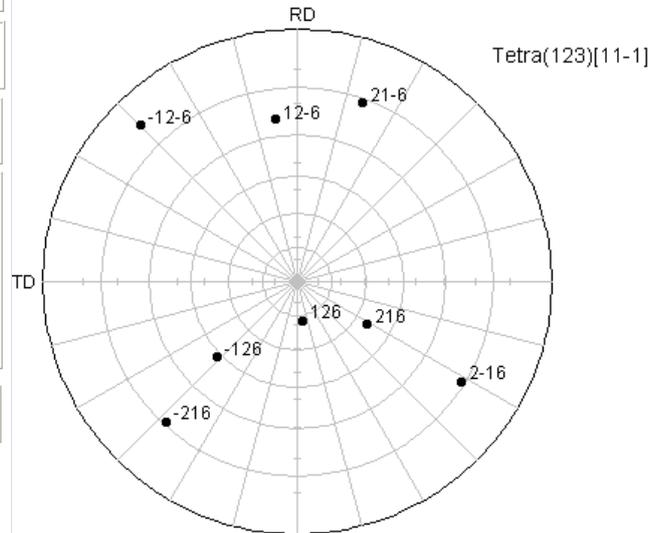
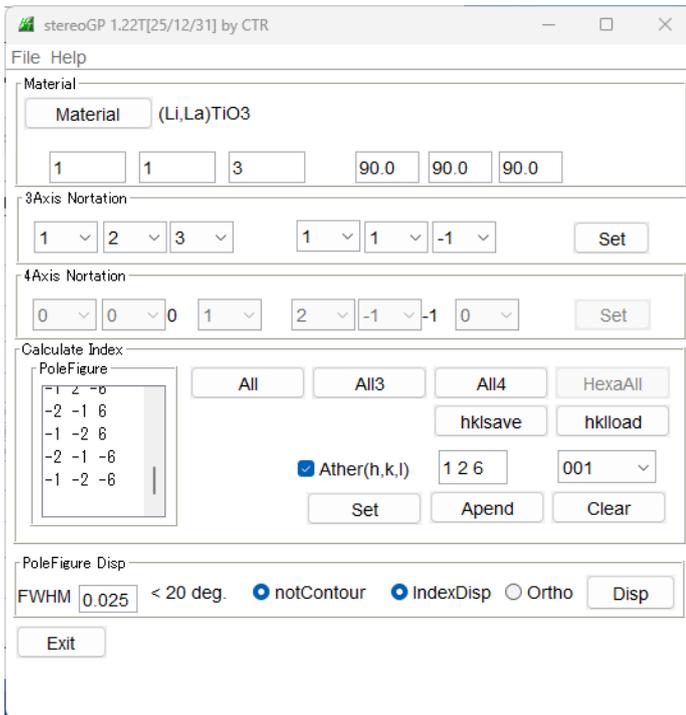
計算を簡単にするために格子定数 w_0 (1, 1, 3, 90, 90, 90)とする。

方位を(1 2 3) [1 1 -1]とする。

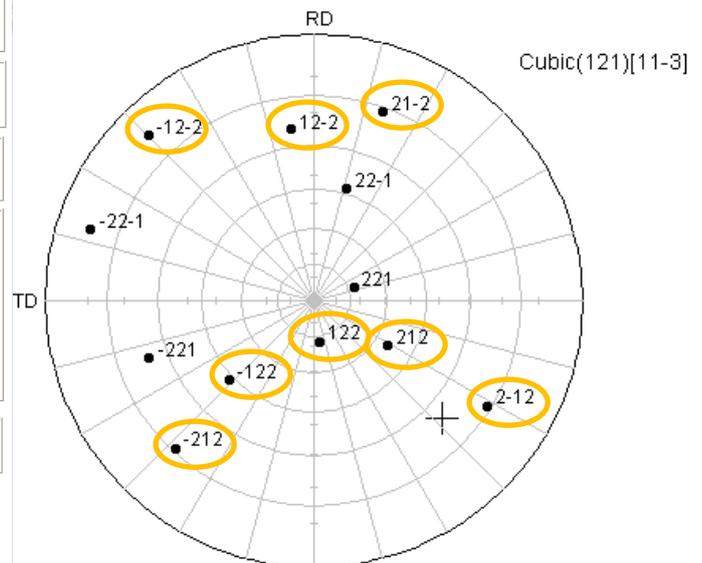
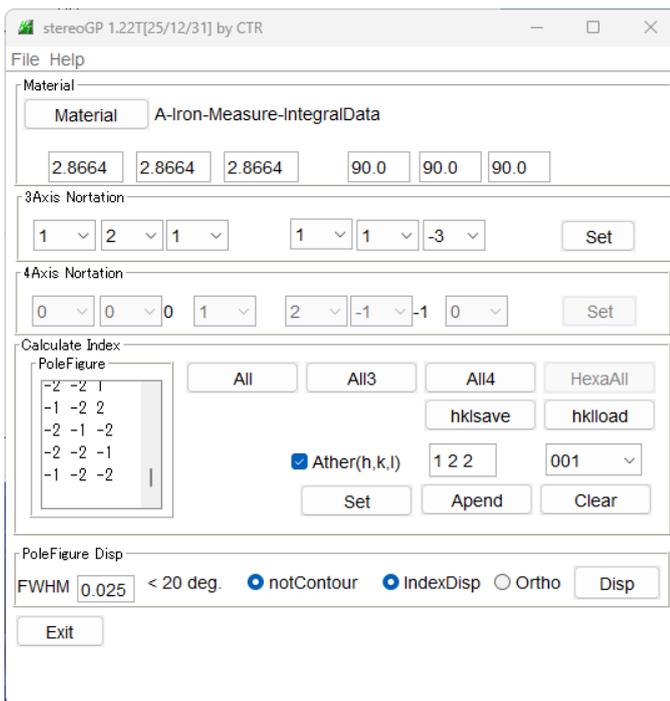
Cubic変換すると(1 2 1) [1 1 -3]である。

ステレオ投影として(1 2 6) \rightarrow Cubicでは(1 2 2)になります。

Tetragonal



Cubic



TetragonalのCubic変換が来ています。

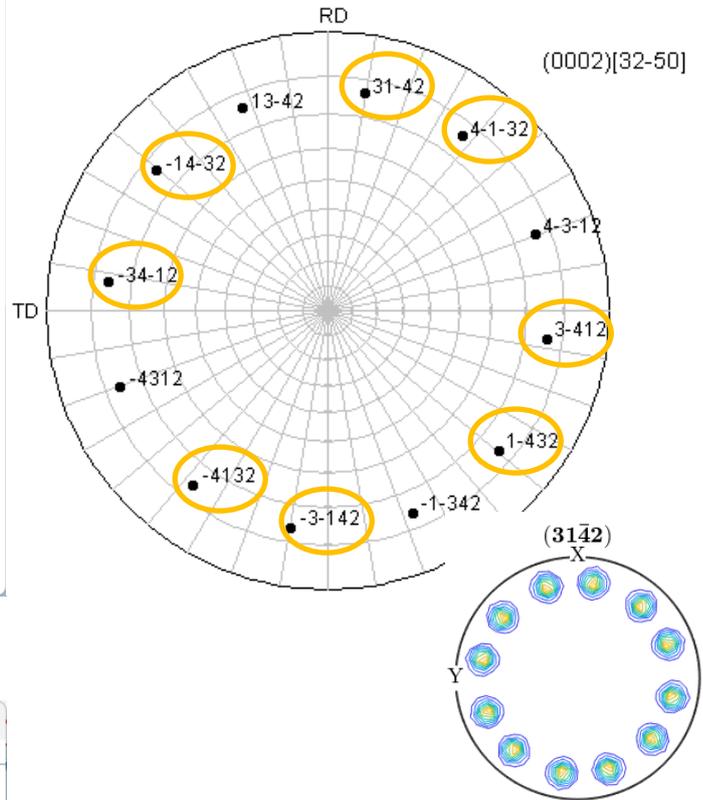
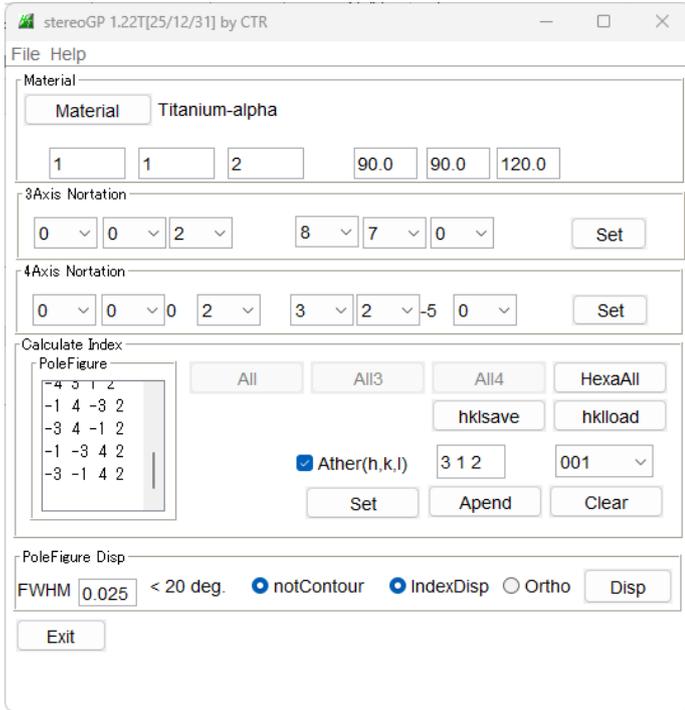
3. HexagonalとCubic比較

変換により実数の指数になり変換が困難なため、概略比較を行う。

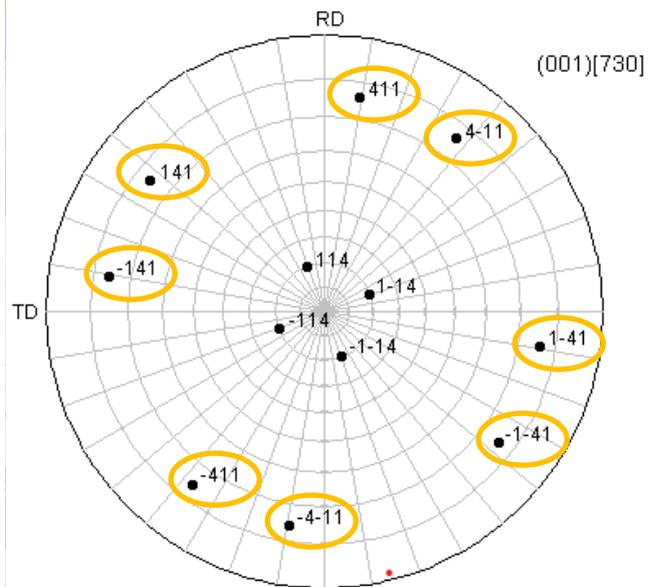
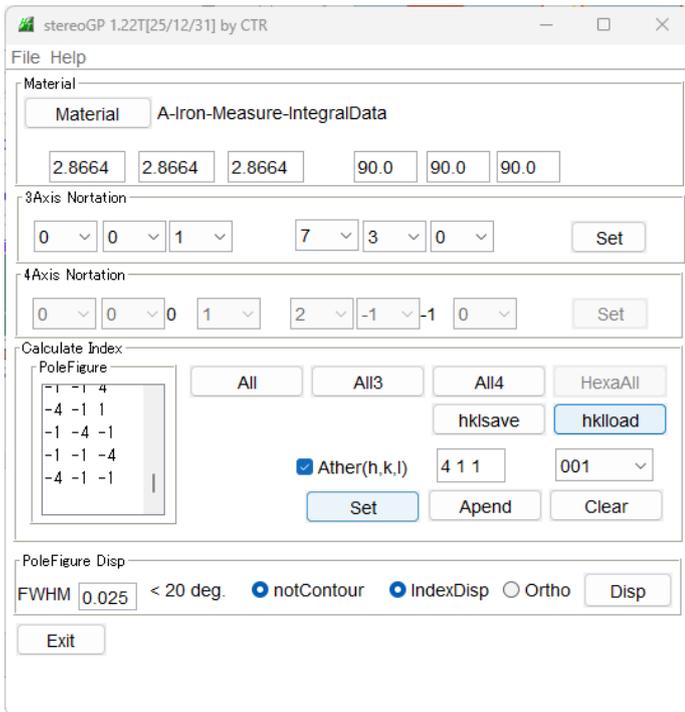
Hexagonalの格子定数を(1, 1, 2, 90, 90, 120)とし

方位を(0002) [32-50]としCubic変換では(0, 0, 1) [6. 92, 3, 0]を
(001) [730] 比較を行う。扱う方位を(31-42) Cubic (411)

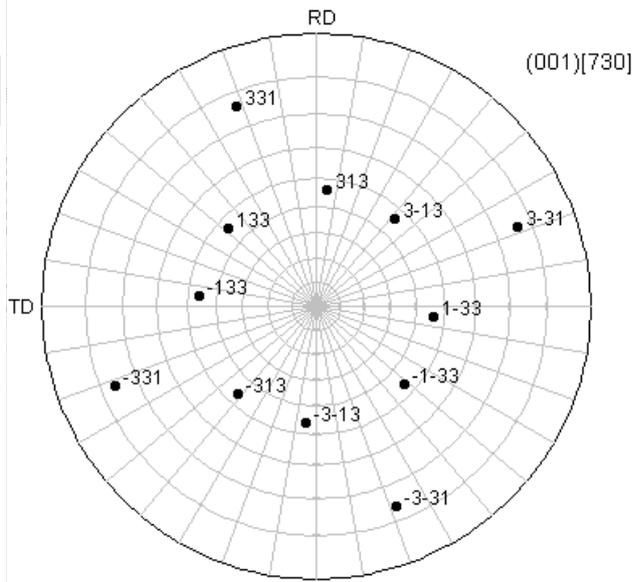
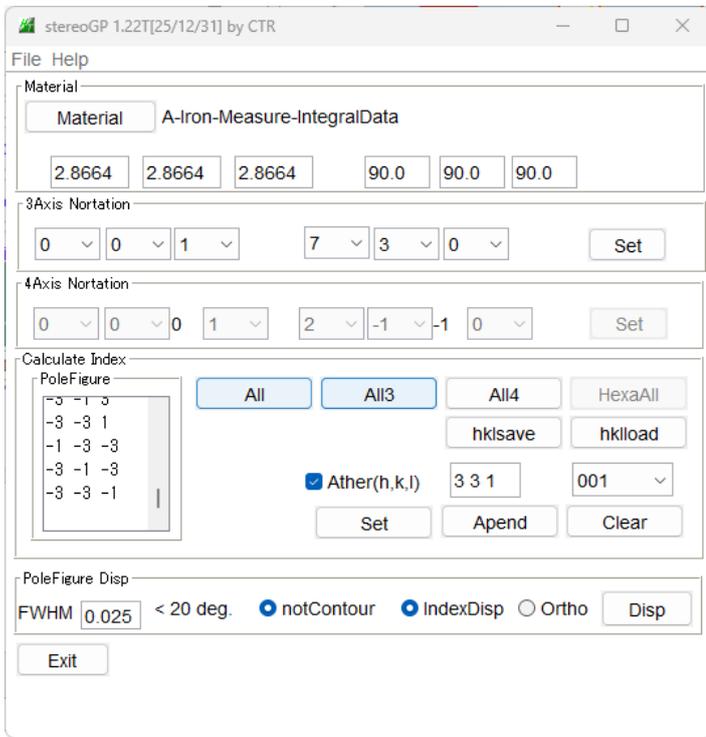
Hexagonal



Cubic



Hexaのマークなしは、Cubicの(331)の位置



この方法によりリガク [X線回折ハンドブック] SiO_2 (0001) $[-1010]$

