Hexagonal の為の軸変換ソフトウエア

HexaConvertソフトウエア

Ver.1.13

| HexaConvert 1.12ST[25/12/31] by CTR − □ × | | |
|--|--|--|
| | | |
| A 🗆 X-Axis[100] ([2-1-10]) 🗼 B 🛛 X-Axis[210] ([10-10]) | | |
| MIller Notation (3Axis Notation) | | |
| HexaConvert 1.12ST[25/12/31] by CTR A N= X-Axis[100] ([2-1-10]) A X-Axis[100] ([2-1-10]) A X-Axis[210] ([10-10]) Miller Notation (3Axis Notation) O 1 4 2 2 4 1 Hki uvvv Miller Braveis Notation/4 Axis Notation) O 1 - 1 4 2 2 2 1 Hki uvvv Euler(p1Fp2) 90.0 24.627 30.0 Material select Titanium-alpha.TXT C/a 1.588 Input ψ2 Angles 0 Calc DISP BG Corr Black Line size 1.0 MINUS Polefigure FWHM 5 degree Polefigure OK Return Structure | | |
| Convert 1.12ST[25/12/31] by CTR $-$ × ap Help A \sim Axis[100] ([2-1-10]) \land B \sim X-Axis[210] ([10-10]) \land Notation (3Axis Notation) D \sim 1 \sim 4 \sim 2 \sim 4 \sim 1 \sim hk1 uvv Bravais Notation(4 Axis Notation) \sim 1 \sim 1 4 \sim 0 \sim 2 \sim 2 1 \sim hk1 uvv Euler(p1Fp2) \circ 90.0 24.627 30.0 Material select Titanium-alpha.TXT \sim c/a 1.588 Input ψ 2 Angles 0 Calc P Position 10 \sim Disp size 200 \sim DISP BG Corr Black \sim Line size 1.0 \sim MINUS efigure VHM 5 degree Polefigure 1.1.1 \circ Orthorhombic Disp OK Return Structure | | |
| HexaConvert 1.125T[25/12/31] by CTR - × Step Help A ×-Axis[100] ([2-1-10) Miller Notation (3Axis Notation) O 1 4 - 2 - 4 1 hki uvw filler Bravais Notation(4 Axis Notation) O 1 - 1 4 0 - 2 2 1 hki uvvw Euler(p1Fp2) 90.0 24.627 30.0 Material select Titanium-alpha.TXT c/a 1.588 Input ψ2 Angles O Calc DISP Position 10 Disp size 200 DISP BG Corr Black Line size 1.0 MINUS Polefigure FWHM 5 degree Polefigure 1.1.1 O Orthorhombic Disp OK Return Structure | | |
| HexaConvert 1.12ST[25/12/31] by CTR $-$ × 2 Step Help Miller Notation (3Axis Notation) 0 	 1 	 4 	 -2 	 4 	 1 	 hkl 	 uvw A $-2 	 4 	 1 	 hkl 	 uvw$ A $-2 	 4 	 1 	 hkl 	 uvw$ A $-2 	 4 	 1 	 hkl 	 uvw$ 1 	 -2 	 4 	 1 	 hkl 	 uvw 1 	 -2 	 2 	 4 	 1 	 hkl 	 uvw 1 	 -2 	 2 	 2 	 1 	 hkl 	 uvww 1 	 -2 	 2 	 2 	 1 	 hkl 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 2 	 1 	 hkl 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 1 	 hkl 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 1 	 hkl 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 1 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 1 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 1 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 1 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 uvww 2 	 -2 	 2 	 2 	 uvwww 2 	 -2 | | |
| 90.0 24.627 30.0 | | |
| | | |
| HexaConvert 1.12ST[25/12/31] by CTR – × a Step Help A X-Axis[100] ([2-1-10) A B X-Axis[210] ([10-10) Miller Notation (3Axis Notation) @ 0 1 4 2 2 4 1 A Hel UVW Miller Bravais Notation/ 0 1 4 2 2 4 1 A Hel UVW Euler(p1Fp2) 90.0 24.627 30.0 Material select Titanium-alpha.TXT c/a 1.588 Input ψ2 Angles 0 Calc DISP Position 10 Disp size 200 DISP BG Corr Black Line size 1.0 MINUS Polefigure FWHM 5 degree Polefigure 1,1,1 O Orthorhombic Disp OK Return Structure | | |
| A > Axis[100] (2-1-10) B X Axis[210] ([10-10) Miller Notation (3Axis Notation) 0 1 4 -2 -4 1 hkl uvw Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) 0 -2 2 1 hkl uvw Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) 0 -2 2 1 hkl uvw 0 1 -1 4 0 -2 2 1 hkl uvw 0 1 -1 4 0 -2 2 1 hkl uvw 0 1 -1 4 0 -2 2 1 hki uvw 0 1 -1 4 0 -2 2 1 w <td< td=""></td<> | | |
| c/a 1.588 Input ψ2 Angles 0 Calc | | |
| DISP | | |
| Position 10 V Disp size 200 V DISP | | |
| | | |
| BG Corr Diack C Line size 1.0 Minus | | |
| Polefigure | | |
| FWHM 5 degree Polefigure 1,1,1 O Orthorhombic Disp | | |
| OK Return Structure | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| BG Corr Black Line size 1.0 MINUS Polefigure FWHM 5 degree Polefigure 1,1,1 Orthorhombic Disp OK Return Structure | | |

非対称(φ1:0->360、Φ:0->90、φ2:0->90)対応



操作して不都合がありましたら odftex@ybb.ne.jp へ連絡下さい。

修正履歴

- * Ver.1.000 2010/09/09 material select 追加
- * Ver.1.001 2011/06/14 *φ* 2>60 の修正
- * Ver.1.001 2011/07/05 直行条件案内リストをサポート (Option)
- *Ver.101Y 2012/09/12 新しい管理に移行
- *Ver1.02Y 2013/01/31 結晶方位図表示ソフトウエア Disp3DHex と連動
- *Ver1.03Y 2014/08/09 Euler 角度入力に対応
- *Ver1.04Y 2014/10/06 Disp3DTriclinic2 で表示
- *Ver1.05Y 2014/10/07 Btype >AType では Euler 角度 φ 2 が+30 から-30 に変更
- *Ver1.06Y 2015/01/10 最大指数99、{h,k,l}<u,v,w>表示に変更
- *Ver1.08Y 2015/03/30 非対称ODFの見直しと CrystalOrientationDisp との連携
- *Ver1.10 2018/07/16 φ1=0のオペレーション変更
- *Ver1.11 2019/02/03 Condition save で Euler 角度も save
- *Ver1.12 2025/01/12 極点図Createの追加
- *Ver1.13 2025/01/13 バク修正

- 目次
- 1. 概要
- 2. 表記方法
- 3. 直交座標系
- 4. 3Axis、4Axis変換式
- 5. ソフトウエアの使い方
- 6. 計算例
 - 6.1 (0001)[10-10]の場合
 - 6.2 (01-13)[2-1-10]の場合
- 7. Option 機能、h k l 、u v w の l i s t 表示
- 8. Euler角度入力
- 9. Disp3DTriclinic2との連動
- 10. φ1が90度以上の場合
- 11. 繰り返し同一データの使用
- 12. 極点図のcreate
 - 12.1 Hexagonalの対称性

1. 概要

Hexagonal系では表記方法が2種類、直行座標系表記に2種類ある。

この相互変換を1画面で行えるソフトウエアを提供する。

結晶法図との連動(Ver.1.02 以降)

2. 表記方法

Miller Notation (3 Axis Notation)

Miller-Bravais Notation (4 Axis Notation) 3. 直交座標系



x : [1 0 0], y : [1 - 2 0], z : [0 0 1]x : [2 - 1 - 1 0], y : [0 - 1 1 0], z : [0 0 0 1]







Euler角度からMillerIndeices変換

$$\begin{bmatrix} h\\k\\i\\l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\0 & 1 & 0\\-\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\0 & 0 & c/a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sin\phi_2 \sin\phi\\\cos\phi_2 \sin\phi\\\cos\phi \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} u\\v\\t\\w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0\\0 & \frac{2}{3} & 0\\-\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0\\0 & 0 & a/c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\phi_1 \cos\phi_2 - \sin\phi_1 \sin\phi_2 \cos\phi\\-\cos\phi_1 \sin\phi_2 - \sin\phi_1 \cos\phi_2 \cos\phi\\\sin\phi_1 \sin\phi \end{bmatrix}$$

 $\Phi = 0$ の場合、 $\phi 1 + \phi 2$ が計算されるが、単独には計算されません。 手入力による変更は可能にしています。

5. ソフトウエアの使い方

| - | • | - | | - | ~~· | | ~ ~ | | |
|---|----|----|----|----|-----|---|--------------|-----|-----|
| | C: | ¥C | TR | ¥b | in¥ | F | lexaConvert. | jar | を起動 |

| HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR - | |
|---|----------------------|
| | |
| A □ X-AXIS[100] ([2-1-10]) | |
| Miller Notation (3Axis Notation) | |
| | |
| | |
| Euler(p1Fp2) 0.0 46.418 30.0 | |
| Material select | |
| AluminumOxide2.TXT | |
| c/a 2.73 Input ψ2 Angles 0 Calc | |
| DISP | |
| Position 10 Y Disp size 200 Y DISP | |
| BG Corr Black Y Line size 1.0 Y MINUS | |
| | |
| OK Return Structure | |
| A □ X-Axis[100] ([2-1-10]) | 医檀系の切り萃え |
| カチード切り基ク | |
| 「MIller Notation (3Axis Notation) | |
| | |
| | |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) | |
| | |
| Eular Angle(fai1,FALfai2) | |
| 0.0 | |
| | |
| | |
| Linguine li My I (| CDD登録で |
| exagonalの名称を表示、選択で軸比変更が可能 | |
| 1.625 Input w2 Angles 0 Calc | |
| 此の入力(1. 625でマグネシウム用である) | |
| nput ψ2 Angles 0 はEuler角度が定まらない場合のφ2; | 角度指定 |
| | |
| Calc は、Euler角度計算と軸変換を行う。 | |
| 指数変換時 指定指数が表色に変わる事があります (直行条件が崩れた) | 書合) |
| 10 | <i>9の</i> ひ卦質をわずいて吐べ |
| しるICLEuIEI 用及 M M 巴に変わる笏合、 $\Psi - U$ じ ϕ $I + \phi$ | ムツの可昇されている時で |

| In | put | ພ2 | Ana | les |
|----|------|----|---------|-----|
| | put. | Ψ | / W 154 | |

0

で φ 2 を 指定して下さい。

- 6. 計算例
- 6.1 (0001)[10-10]の場合

| A | (-Axis[100] ([2-1-10]) 🗼 B 🗹 X-Axis[210] ([10-10]) 🕂 |
|--|---|
| MIller Notation | (3Axis Notation) |
| | 0 ∨ 1 ∨ 2 ∨ 1 ∨ 0 ∨ hkl uvw |
| Miller Bravais No | vtation(4 Axis Notation) |
| | Euler(p1Fp2) |
| Mate | rial select |
| Мар | jnesium.TXT v |
| | c/a 1.625 Input ψ2 Angles 0.0 Calc |
| DISP | |
| Positio | n 10 v Disp size 200 v DISP |
| BG Co | rr Black Y Line size 1.0 Y MINUS |
| 1 | OK Return Structure |
| A Contraction | HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR - |
| Maner Hotekion | (-Axis[100] ([2-1-10]) |
| | (Axis Notation) (3Axis Notation) 2 v 1 v 2 v 1 v 0 v hkl uvw |
| Miller Bravais No | (Axis I00] (12-1-10]) |
| Miller Bravais No | $(Axis[100]([2-1-10]) \land B \lor X-Axis[210]([10-10]) \land (Axis Notation) \land (Axis Notation$ |
| Miller Bravais N | $(-Axis[100](12-1-10]) \land B \lor X-Axis[210](110-10]) \land (3Axis Notation) \land (3Axis Notation) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor hkl uvw) \land (4Axis Notation) \land (4Axis Notation) \land (1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor hkil uvxw) \land (2 \lor 1 \lor 0 \lor -1) 0 \lor -1) 0 \lor (2 \lor 0 \lor $ |
| Miller Bravais N | $(-Axis[100]([2-1-10]) \land B \land X-Axis[210]([10-10]) \land Axis[210]([10-10]) $ |
| Miller Bravais N 0 0 0 | $(Axis [100] (12-1-10]) \land B \land Axis [210] (110-10]) \land Axis Notation) \land B \land Axis Notation) \land B \land Axis Notation) \land B \land B \land Axis Notation) \land B \land $ |
| Miller Bravais N | $(Axis[100]([2-1-10]) \land B \land Axis[210]([10-10]) \land Axis[Axis[Axis[Axis[Axis[Axis[Axis[Axis[$ |
| Miller Bravais N | $(-Axis[100](2-1-10]) \land B \lor X-Axis[210]((10-10)) \land Axis Notation) \land 1 \lor 2 \lor 1 \lor 0 \lor hkl = uvw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 1 \lor 0 \lor -1 \circ hkl = uvxw \Rightarrow 0 \land 0 \lor 0 \lor$ |
| DISP DISP DISP DISP DISP DISP | $(Axis I 100) ((2-1-10)) \land B \lor X Axis (210) ((10-10)) \land Axis (210) ((10-10)) ((10-10)) \land Axis (210) ((10-10)) $ |
| DISP Positio BG Co | $(Axis I 100) (I2-1-10)$ $(Axis Notation)$ $(Axis Notation)$ $(Axis Notation)$ $(Axis Notation)$ $(Axis Notation)$ $(I \rightarrow 1 \rightarrow 0 \rightarrow -1 \ 0 \rightarrow hkil \ uvxw$ $Euler(p IFp2)$ $(0.0 \ 0.0 $ |

3軸表記では(001)[210]である事分かります。

| HexaConvert 1.1051[19/03/30] by CTR |
|---|
| |
| A ♥ X-Axis[100] ([2-1-10]) |
| MIller Notation (3Axis Notation) |
| 0 1 2 1 0 hki uvw |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) |
| |
| |
| |
| Magnesium.TXT V |
| |
| c/a 1.625 Input ψ2 Angles 30.0 Calc |
| DISP |
| Position 10 V Disp size 200 V DISP |
| BG Corr Black V Line size 1.0 V MINUS |
| |
| OK Return Structure |
| |
| |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 # HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR - □ ▲ |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR - □ × File Step Help A ☑ X-Axis[100] ([2-1-10]) 上 B □ X-Axis[210] ([10-10]) 上 |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 4 HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR - □ × File Step Help A ☑ X-Axis[100] ([2-1-10]) |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR - □ × File Step Help ▲ ● X-Axis[100] ([2-1-10]) |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR - □ × File Step Help ▲ ♥×-Axis[100] ([2-1-10]) |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 MexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR - □ ▲ File Step Help ▲ ●×-Axis[100] ([2-1-10]) |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 ▲ ● A ● X - Axis[100] ((2-1-10)) ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 メームマン語の 「日本の名の「(2-1-10)」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」」 |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 |
| Input ψ2 Angles 30.0 Calc で確認 MacConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR |

である事が分かります。

6. 2(01-13)[2-1-10]の場合

| HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR – 🗆 🗙 | | | | | | |
|---|--|--|--|--|--|--|
| File Step Help | | | | | | |
| A □ X-Axis[100] ([2-1-10]) | | | | | | |
| MIller Notation (3Axis Notation) Image: Constraint of the second secon | | | | | | |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) 0 0 0 0 1 0 -1 0 hkil uvxw | | | | | | |
| Euler(p 1Fp 2) □ 0.0 30.0 | | | | | | |
| Material select | | | | | | |
| Magnesium. TXT V | | | | | | |
| c/a 1.625 Input ψ2 Angles 30.0 Calc | | | | | | |
| DISP | | | | | | |
| Position10Disp size200DISPBG CorrBlackLine size1.0MINUS | | | | | | |
| OK Return Structure | | | | | | |

Calc

T

| HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR |
|---|
| File Step Help |
| A □ X-Axis[100] ([2-1-10]) |
| MIller Notation (3Axis Notation) Image: Constraint of the second secon |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) 0 -1 -1 2 -1 -1 0 hkil uvxw |
| Euler(p1Fp2) 0.0 32.024 30.0 |
| Material select Magnesium.TXT |
| c/a 1.625 Input ψ2 Angles 30.0 Calc |
| DISP |
| Position 10 V Disp size 200 V DISP |
| BG Corr Black V Line size 1.0 V MINUS |
| OK Return Structure |

3 軸表記で(013)[100]であり、Euler 角度は(0.0,32.024,30.0)

3軸表記に切り替えて、再計算しても値は変わりません。

| MIller Notation (3Axis Notation) | | |
|--|-------------|---|
| ☑ 0 • 1 • 3 • | 1 • 0 • 0 • | |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) — | | |
| □ 0 · 1 · -1 3 · | 2 -1 -1 0 | Ŧ |

7. Option機能、hkl、uvwのlist表示

| _MIIIer Notation (3Axis Notation) | |
|-----------------------------------|---|
| | |
| で<100>に対する{hkl}の list を表示 | <mark></mark> で{013}に対する <uvw>を表示</uvw> |
| {0 -15 -14}<1 0 0> | {0 1 3}<-15 -12 4> |
| {0 -15 -13}<1 0 0> | {0 1 3}<-15 -6 2> |
| {0 -15 -11}<1 0 0> | {0 1 3}<-15 -3 1> |
| (0 1 -2}<1 0 0> | {0 1 3}<1 -6 2> |
| (0 1 -1}<1 0 0> | {0 1 3}<1 -3 1> |
| (0 1 0}<1 0 0> | {0 1 3}<1 0 0> |
| (0 1 1}<1 0 0> | {0 1 3}<1 3 -1> |
| (0 1 2}<1 0 0> | {0 1 3}<1 6 -2> |
| {0 15 11}<1 0 0> | {0 1 3}<15 3 -1> |
| {0 15 13}<1 0 0> | {0 1 3}<15 6 -2> |
| {0 15 14}<1 0 0> | {0 1 3}<15 12 -4> |

| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) | ✓ -1 0 ✓ hkil uvxw |
|---|--|
| 同様に hkil で{hkil}に対する <uvxw></uvxw> | uvxw で{uvxw>に対する{hkil}を表示 |
| {0 -15 15 -14}<2 -1 -1 0> {0 -15 15 -13}<2 -1 -1 0> {0 -15 15 -11}<2 -1 -1 0> {0 -15 15 -8}<2 -1 -1 0> {0 -15 15 -8}<2 -1 -1 0> | {0 1 -1 3}<-15 -12 27 13> {0 1 -1 3}<-15 -9 24 11> {0 1 -1 3}<-15 -3 18 7> |

8. Euler角度入力

| 90 | | 24.6 | 30.0 | | |
|-----------------------------------|-------|-----------|--------|------|------|
| Material select — Titanium.TXT | | | | | ~ |
| | | | | | |
| c/a | 1.587 | Input ψ27 | Angles | 30.0 | Calc |

Euler角度を入力し、Calcで3指数、4指数表記計算を行う。

Euler角度入力では本来、実数の MillerIndices が計算されるが、整数の MillerIndices では

Euler角度と一致しない。

例えば、Euler 角度{50,50,50}で計算した MillerIndices は以下であるが、

| 🛛 HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR – 🗆 📉 | | | | | |
|--|--|--|--|--|--|
| File Step Help | | | | | |
| A □ X-Axis[100] ([2-1-10]) | | | | | |
| MIller Notation (3Axis Notation) I 1 2 4 0 -2 1 v hkl uvw | | | | | |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) 1 2 3 4 2 4 2 3 hkil uvxw | | | | | |
| Euler(p1Fp2) 50 50 50 | | | | | |
| Material select Titanium.TXT | | | | | |
| c/a 1.587 Input ψ2 Angles 50.0 Calc | | | | | |
| ∫ DISP ───── | | | | | |
| Position 10 v Disp size 200 v DISP | | | | | |
| BG Corr Black V Line size 1.0 V MINUS | | | | | |
| OK Return Structure | | | | | |

計算された MIllerIndices で再計算した Euler 角度は異なります。

| Miller Bravais I | Notation(4 Axis No | otation) —— | | | | | |
|------------------|--------------------|-------------|---------|----------|------|------|------|
| ✓ 1 v 2 | 2 🗸 -3 | 4 ¥ | 2 ¥ | -4 v 2 | 3 🗸 | hkil | UVXW |
| | Euler(p1Fp2) | | | | | | |
| | 53.6 | 9 5 | 0.477 | 49.11 | | | |
| г Ма | terial select | | | | | | |
| Tit | anium.TXT | | | | | ~ | |
| <u></u> | | | | | | | |
| | c/a | 1.587 | Input ψ | 2 Angles | 50.0 | Calc | |

9. Disp3DTriclinic2との連動

| 22 | HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR – 🗆 |
|-------------|---|
| File St | ep Help |
| | A □ X-Axis[100] ([2-1-10]) |
| Miller | r Notation (3Axis Notation) |
| | 1 v 1 v 1 v 0 v -1 v 1 v hkl uvw |
| [Miller | Bravais Notation(4 Axis Notation) |
| | 1 v 1 v -2 1 v 1 v -2 v 1 3 v hkil uvxw |
| | Euler(p1Fp2) |
| | 62.5 72.512 60.0 |
| | Material select |
| | Titanium.TXT V |
| | |
| | c/a 1.587 Input ψ2 Angles 50.0 Calc |
| | |
| DIS | P |
| | Position 10 Y Disp size 200 Y DISP |
| | BG Corr Black Y Line size 1.0 Y MINUS |
| | |
| | OK Return Structure |
| | |
| で計算し | た結果の結晶方位図を表示する |
| Position | は、結晶方位図画面の表示位置 |
| Dispsize | は、表示画面のサイズ |
| BG Corr | は、表示画面のバックグランドの色、黒と白の選択 |
| Linesize | は、表示画面に使用している線幅 |
| | |
| | |
| A | X-Axis[100] ([2-1-10]) |
| ABの選 | 出で Atyme と Btyme の表示切り株文 |
| r,D ♥)æ | meters Augure これなりの有た。 |
| | |
| - Miller Pr | avais Notation(4 Avis Notation) |
| | |
| | |
| った券 | 4指数を切り替える。 |





Btype の4指数



変わるのは、X軸とY軸、AとBで ϕ 2Euler角度である。

Atype と Btype の E u l e r 角度 ø 2 に 関して



B t y p e $-\!>\!A\,T$ p t e

Euler角度φ2に関して

ATуре=BTуре-30である。

本ソストウエアで確認

Btype の(-124)[]210]で Calc->(0.0,38.432,0.0)が得られる

(通常は、h k l は全てマイナス指定ではなく、プラスを指定する)

| A 🖂 X-Axis[100] ([2-1-10]) \checkmark B 🖉 X-Axis[210] ([10-10]) \checkmark |
|--|
| MIller Notation (3Axis Notation) |
| $\boxed{2 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 4 \cdot 2} = 2 \cdot 1 \cdot 0 \cdot hkl uvw$ |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) |
| |
| Eular Angle(fai1,FALfai2) |
| 0.0 38.432 0.0 |
| Material select |
| Titanium.TXT 🔹 |
| |
| c/a 1.587 fai2 0 - Calc |

Btype の(0.0,38.432,60.0)で Calc ——>(114)[1-10]が得られる

| A □ X-Axis[100] ([2-1-10]) | |
|---|------|
| MIller Notation (3Axis Notation) Image: I | UVW |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) I 1 -2 4 1 -1 0 0 hkill | UVXW |
| Euler(p1Fp2) | |
| Material select Titanium.TXT | |
| c/a 1.587 Input ψ2 Angles 60.0 Calc | |

AType の(0.0,38.432,30.0)で Clac—>(114)[1-10]が得られる

| A ☑ X-Axis[100] ([2-1-10]) . B □ X-Axis[210] ([10-10]) | + |
|--|-----------|
| Miller Notation (3Axis Notation) | |
| | hkl uvw |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) | |
| | hkil uvxw |
| Euler(p1Fp2) | |
| ☑ 0.0 38.432 30 | |
| Material select | |
| Titanium.TXT | ~ |
| | |
| c/a 1.587 Input ψ2 Angles 30.0 | Calc |

10. *φ*1が90度以上の場合

| HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR |
|--|
| File Step Help |
| A □ X-Axis[100] ([2-1-10]) |
| Miller Notation (3Axis Notation) |
| Miller Bravais Notation/ -20 v 13 v 7 11 v hkit uvxw |
| Euler(p Fp2) 135 45 45 |
| Material select |
| Titanium.TXT 🗸 |
| c/a 1.587 Input ψ2 Angles 45.0 Calc |
| |
| Position 10 V Disp size 200 V DISP |
| BG Corr White v Line size 1.0 v MINUS |
| OK Return Structure |

| HexaConvert 1.10ST[19/03/30] by CTR – 🗆 🗙 |
|---|
| File Step Help |
| A □ X-Axis[100] ([2-1-10]) |
| Miller Notation (3Axis Notation) |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) 1 v 3 v 4 6 v 5 v 1 v 4 3 v hkil |
| Euler(p1Fp2) I 135 45 45 |
| Material select |
| Titanium.TXT v |
| c/a 1.587 Input ψ2 Angles 45.0 Calc |
| Position 10 V Disp size 200 V DISP |
| BG Corr White V Line size 1.0 V MINUS |
| OK Return Structure |

(135,45,45)から(13-46)[-5143]が 得られる

| A $\ Axis[100]((2-1-10))$ B $\ Axis[210]((10-10))$ MIller Notation(4 Axis Notation) $\ 1 \lor 3 \lor 6 \lor -3 \lor -1 \lor 1 \lor$ Hkl uvw Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) $\ 1 \lor 3 \lor 4 \land 6 \lor 5 \lor 1 \lor 4 \land 3 \lor$ Hkil uvxw ExtertpTFp2) $\ 135.98 47.757 43.9$ Material select Titanium.TXT $\ c/a \ 1.587$ Input $\ \psi 2$ Angles 45.0 Calc DISP Position 10 $\ Disp size$ 200 $\ DISP$ BG Corr White $\ Line size$ 1.0 $\ MINUS$ | ile Step Help |
|--|--|
| $\begin{tabular}{ c c c c c } \hline Miller Notation & Miller Notation & Miller Notation & Miller Bravais Notation & Miller & Line Size & 1.0 & Miller & Miller Bravais Notation & Miller & Miller Bravais Notation & Miller Bravais Notation & Miller & Miller Bravais Notation & Miller & $ | A □ X-Axis[100] ([2-1-10]) |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) $\boxed{1}$ 3 $\sqrt{4}$ 6 $\sqrt{5}$ $\sqrt{1}$ $\sqrt{4}$ 3 $\sqrt{1}$ hkill uvxww $\boxed{1}$ 3 $\sqrt{4}$ 6 $\sqrt{5}$ $\sqrt{1}$ $\sqrt{4}$ 3 $\sqrt{1}$ hkill uvxww $\boxed{1}$ 3 $\sqrt{4}$ 6 $\sqrt{5}$ $\sqrt{1}$ $\sqrt{4}$ 3 $\sqrt{10}$ hkill uvxww $\boxed{1}$ 3 $\sqrt{4}$ 6 $\sqrt{5}$ $\sqrt{1}$ $\sqrt{4}$ 3 $\sqrt{10}$ hkill uvxww $\boxed{1}$ 3 $\sqrt{4}$ 6 $\sqrt{5}$ $\sqrt{1}$ $\sqrt{4}$ 3 $\sqrt{10}$ hkill uvxww $\boxed{1}$ 3 $\sqrt{4}$ 6 $\sqrt{5}$ $\sqrt{1}$ $\sqrt{4}$ 3 $\sqrt{10}$ hkill uvxww $\boxed{1}$ 3 $\sqrt{4}$ 6 $\sqrt{5}$ $\sqrt{1}$ $\sqrt{4}$ 3 $\sqrt{10}$ hkill uvxww $\boxed{1}$ 3 $\sqrt{15}$ $\sqrt{10}$ | Miller Notation (3Axis Notation) 1 1 3 6 -3 -1 1 with the second seco |
| Extert(p1Fp2) 135.98 47.757 43.9 Material select Titanium.TXT c/a 1.587 Input ψ 2 Angles 45.0 Calc DISP Position 10 BG Corr White Line size 1.0 MINUS | Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) |
| I35.98 47.757 43.9 Material select Itanium.TXT c/a 1.587 Input ψ2 Angles display="block">DISP Position 10 V Disp size 200 V BG Corr White Line size Disp 1.0 MINUS | Euter(pTFp2) |
| Material select Titanium.TXT c/a 1.587 Input ψ2 Angles 45.0 Calc DISP Position 10 V Disp size 200 V DISP BG Corr White V Line size 1.0 V MINUS | 135.98 47.757 43.9 |
| Titanium.TXT v c/a 1.587 Input ψ2 Angles 45.0 Caic DISP Position 10 v Disp size 200 v DISP BG Corr White v Line size 1.0 MINUS | Material select |
| c/a 1.587 Input ψ2 Angles 45.0 Calc DISP Position 10 v Disp size 200 v DISP BG Corr White v Line size 1.0 v MINUS | Titanium.TXT v |
| DISP Position 10 v Disp size 200 v DISP BG Corr White v LIne size 1.0 v MINUS | c/a 1.587 Input ψ2 Angles 45.0 Calc |
| Position 10 v Disp size 200 v DISP BG Corr White v Line size 1.0 MINUS | ∫ DISP |
| BG Corr White v Line size 1.0 v MINUS | Position 10 v Disp size 200 v DISP |
| | BG Corr White v Line size 1.0 v MINUS |
| OK Return Structure | OK Return Structure |

(13-46)[-5143]から (135.61,47.757,43.9)が計算されます

11.繰り返し同一データの使用

GPODFDisplayなどで使用する場合、同一物質画面が必要になります。 選択せずに同一物質を表示させるには、物質をsaveさせて下さい。

| HexaConvert 1.10ST[19/09/30] by CTR × | | | | |
|---|--|--|--|--|
| File Step Help | | | | |
| Condition save | | | | |
| 100] ([2-1-10]) | | | | |
| - Miller Notation (20via Notation) | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) | | | | |
| □ 0 v 1 v -1 4 v 0 v -2 v 2 1 v hkil uvxw | | | | |
| Euler(p1Fp2) | | | | |
| 90.0 24.627 30.0 | | | | |
| | | | | |
| Material select | | | | |
| Titanium.TXT 🗸 | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| c/a 1.587 Input ψ2 Angles 0 Caic | | | | |
| | | | | |
| DISP | | | | |
| Position 10 Y Disp size 200 Y DISP | | | | |
| | | | | |
| BG Corr Black V Line size 1.0 V MINUS | | | | |
| | | | | |
| OK Return Structure | | | | |
| | | | | |
| | | | | |

12. 極点図のcreate

方位から極点図の作成を行う。

| HexaConvert 1.12ST[25/12/31] by CTR | – 🗆 X |
|--|----------------|
| File Step Help | |
| A 🗆 X-Axis[100] ([2-1-10]) 🗼 B 🗹 X-Axis[210] ([10-10]) | |
| MIller Notation (3Axis Notation) □ 1 ∨ 1 √ 1 ∨ | hkl uvw |
| Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) $1 \sim 1 \sim -2 2 \sim -1 \sim -1 \sim 2 3 \sim -1 \sim -1 \sim 2$ | hkil uvxw |
| Euler(p1Fp2) 90.0 57.8 60.0 | |
| Material select Titanium-alpha.TXT | ✓ |
| c/a 1.588 Input ψ2 Angles 0 C | alc |
| | |
| Position10 \checkmark Disp size200 \checkmark BG CorrBlack \checkmark Line size1.0 \checkmark | DISP |
| Polefigure FWHM 5 degree Polefigure 1,1,1 O Orthorhomb | ic Disp |
| OK Re | turn Structure |
| | |
| | |

極点図create



12.1 Hexagonalの対称性

Hexagonalでは、3指数と4指数表現があるが、対称性を考えると4指数が適している。 極点図作成では4指数を取り込み、Triclinicで表現する。

{112} 極点図をTriclinicで表現すると



Triclinic->Orthorhombicで



とした。

内部計算は [チタンおよびチタン合金の集合組織] 井上博史氏の4指数から直交座標 (h k i 1) [u v t w] から(HKL) [UVW] に変換し方位計算を行った。

極点図表示に使用したデータは、

CTR¥work¥NewCubicCODispホルダに保存されます。 Calcで削除されます。