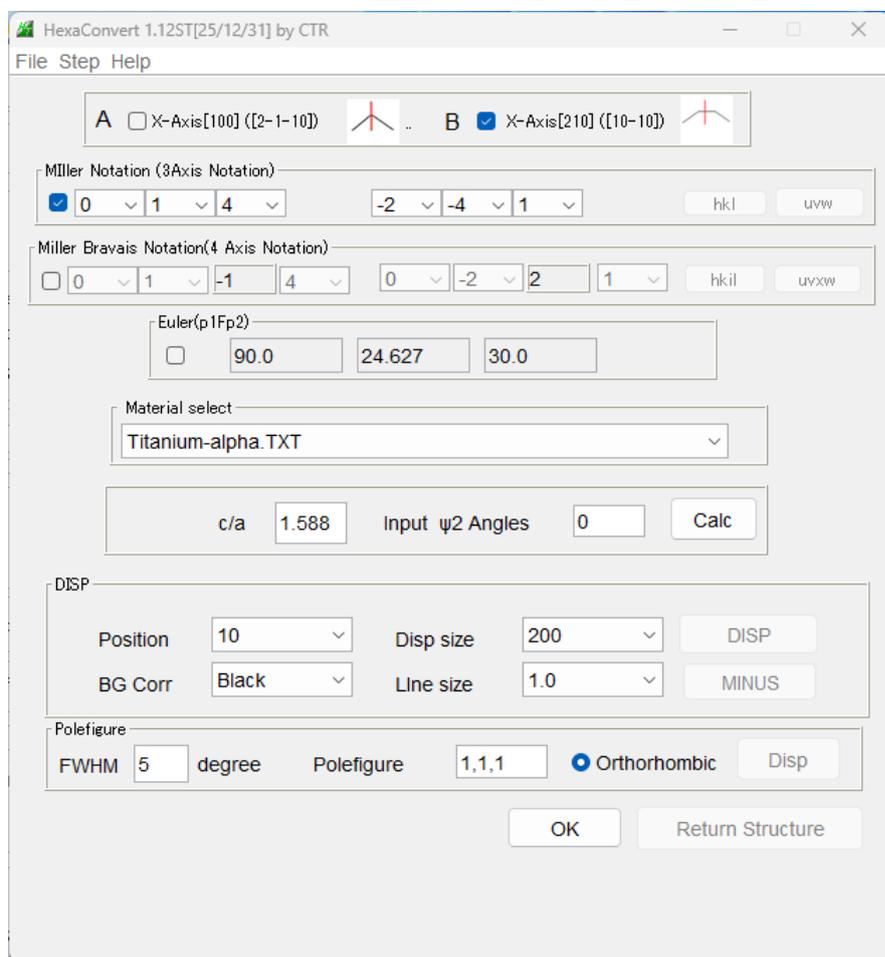


Hexagonal の為の軸変換ソフトウェア

HexaConvert ソフトウェア

Ver.1.13



非対称 ($\phi 1 : 0 \rightarrow 360$ 、 $\Phi : 0 \rightarrow 90$ 、 $\phi 2 : 0 \rightarrow 90$) 対応

2025年01月13日



HelperTex Office

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 $\phi 2 > 60$ 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
- *Ver.1.02Y 2013/01/31 結晶方位図表示ソフトウェア Disp3DHex と連動
- *Ver.1.03Y 2014/08/09 Euler 角度入力に対応
- *Ver.1.04Y 2014/10/06 Disp3DTriclinic2 で表示
- *Ver.1.05Y 2014/10/07 Btype->AType では Euler 角度 $\phi 2$ が+30 から-30 に変更
- *Ver.1.06Y 2015/01/10 最大指数 9 9、 $\{h,k,l\} <u,v,w>$ 表示に変更
- *Ver.1.08Y 2015/03/30 非対称ODFの見直しと CrystalOrientationDisp との連携
- *Ver.1.10 2018/07/16 $\phi 1=0$ のオペレーション変更
- *Ver.1.11 2019/02/03 Condition save で Euler 角度も save
- *Ver.1.12 2025/01/12 極点図 Create の追加
- *Ver.1.13 2025/01/13 バグ修正

目次

1. 概要
2. 表記方法
3. 直交座標系
4. 3 Axis、4 Axis 変換式
5. ソフトウェアの使い方
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. E u l e r 角度入力
9. D i s p 3 D T r i c l i n i c 2 との連動
10. $\phi 1$ 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 c r e a t e
 12. 1 H e x a g o n a l の対称性

1. 概要

Hexagonal系では表記方法が2種類、直交座標系表記に2種類ある。

この相互変換を1画面で行えるソフトウェアを提供する。

結晶法図との連動(Ver.1.02以降)

2. 表記方法

Miller Notation (3 Axis Notation)

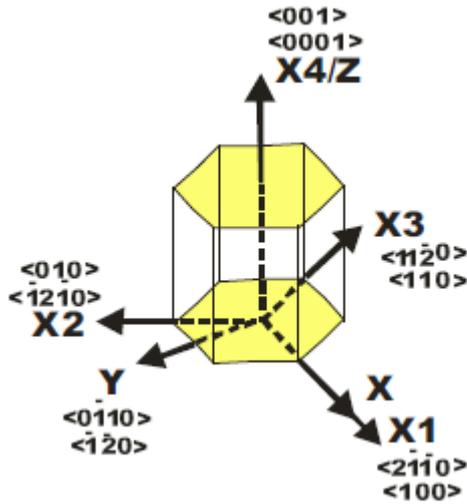
Miller-Bravais Notation (4 Axis Notation)

3. 直交座標系



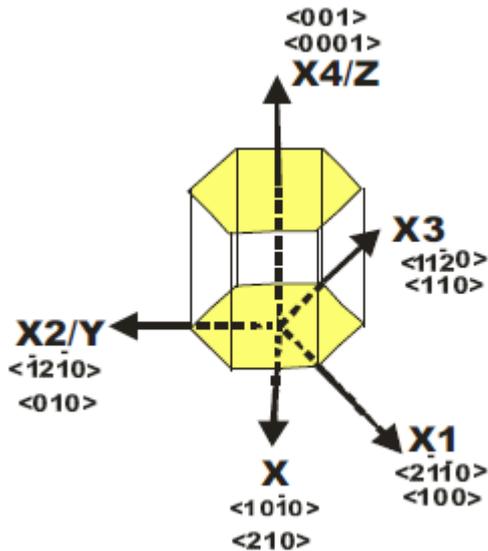
x : [1 0 0]、 y : [1 -2 0]、 z : [0 0 1]

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



x : [2 1 0]、 y : [0 1 0]、 z : [0 0 1]

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



4. 3 Axis 4 Axis 変換式

3軸→4軸変換

Plane {hkl} to {HKLI L}

$$H=h$$

$$K=k$$

$$I=-(h+k)$$

$$L=l$$

Direction <uvw> to {UVTW}

$$U=(2h-k)/3$$

$$V=(2k-h)/3$$

$$T=-(h+k)/3$$

$$W=w$$

4軸→3軸変換

Plane {HKLI L} to {hkl}

$$h=H$$

$$k=K$$

$$l=L$$

Direction <UVTW> to <uvw>

$$u=U-T$$

$$v=V-T$$

$$w=W$$

Euler角度からMiller Indices 変換

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

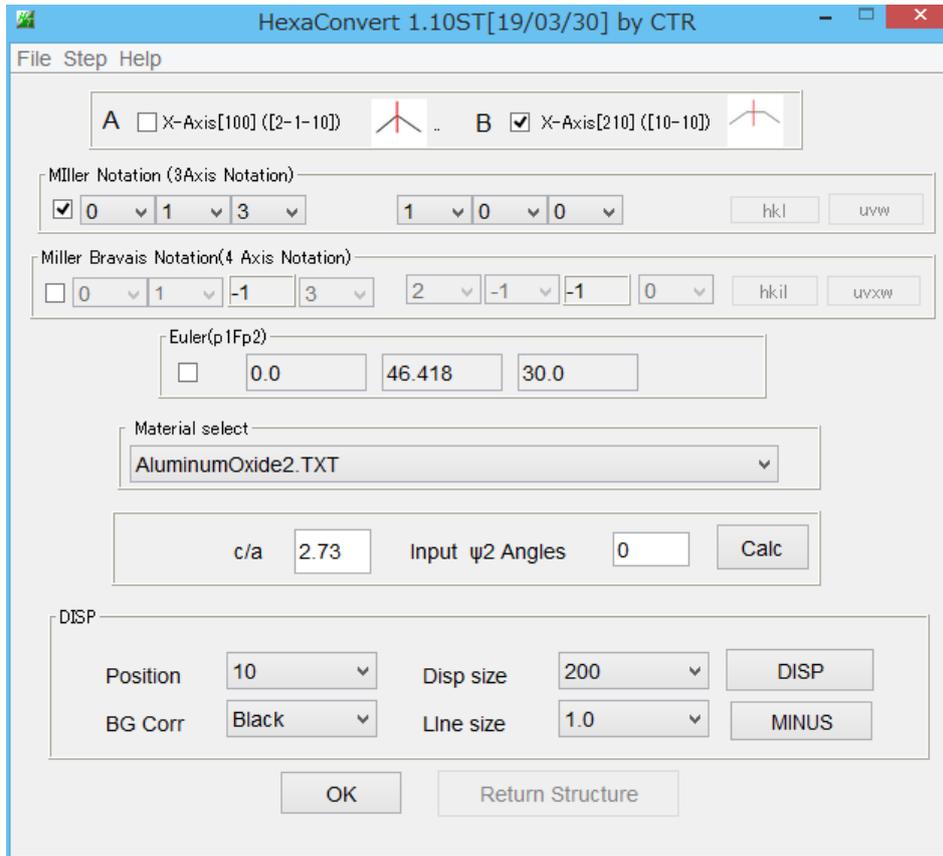
$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ t \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & a/c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi \\ -\cos \phi_1 \sin \phi_2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

$\Phi=0$ 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。

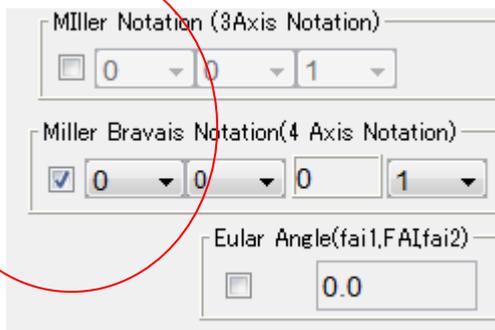
5. ソフトウェアの使い方

C:\¥CTR¥bin¥HexaConvert.jar を起動



は直行座標系の切り替え

入力モード切り替え



はMy I CDD登録で

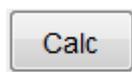
Hexagonal の名称を表示、選択で軸比変更が可能



軸比の入力 (1.625でマグネシウム用である)



はEuler角度が定まらない場合のφ2角度指定



は、Euler角度計算と軸変換を行う。

軸指数変換時、指定指数が赤色に変わる事があります。(直行条件が崩れた場合)

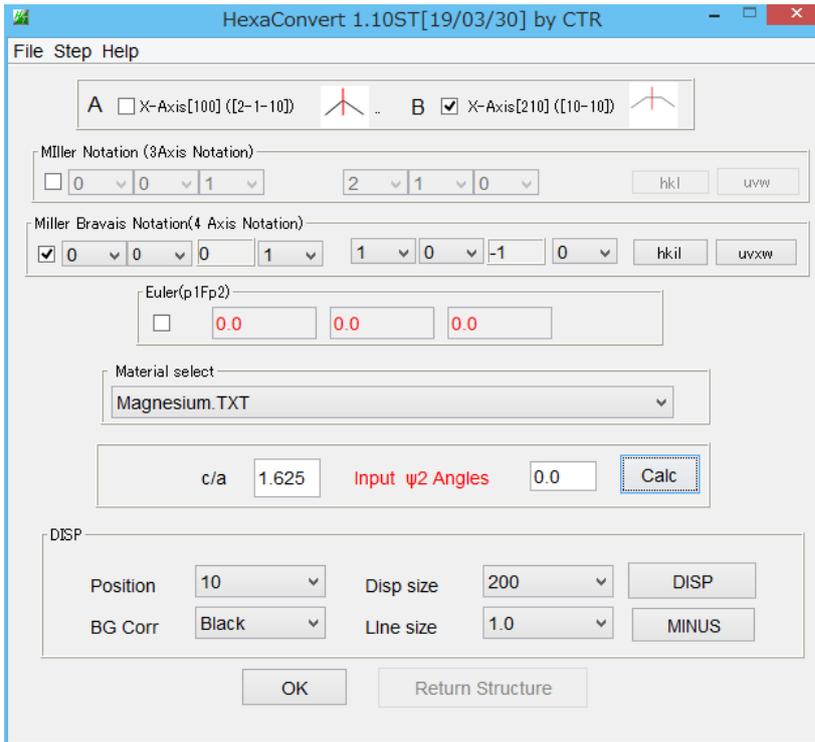
CalcでEuler角度が赤色に変わる場合、 $\Phi = 0$ で $\phi_1 + \phi_2$ のみ計算されている時で

Input ψ 2 Angles

で ϕ 2 を指定して下さい。

6. 計算例

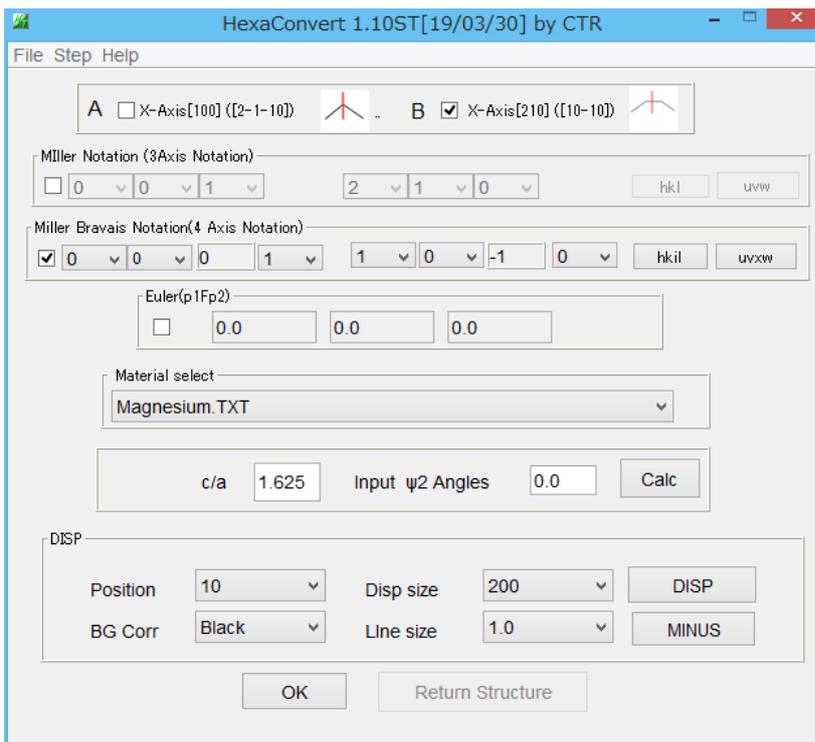
6. 1 (0001)[10-10]の場合



Euler 角度が Input ψ 2 Angles が赤色になっているので



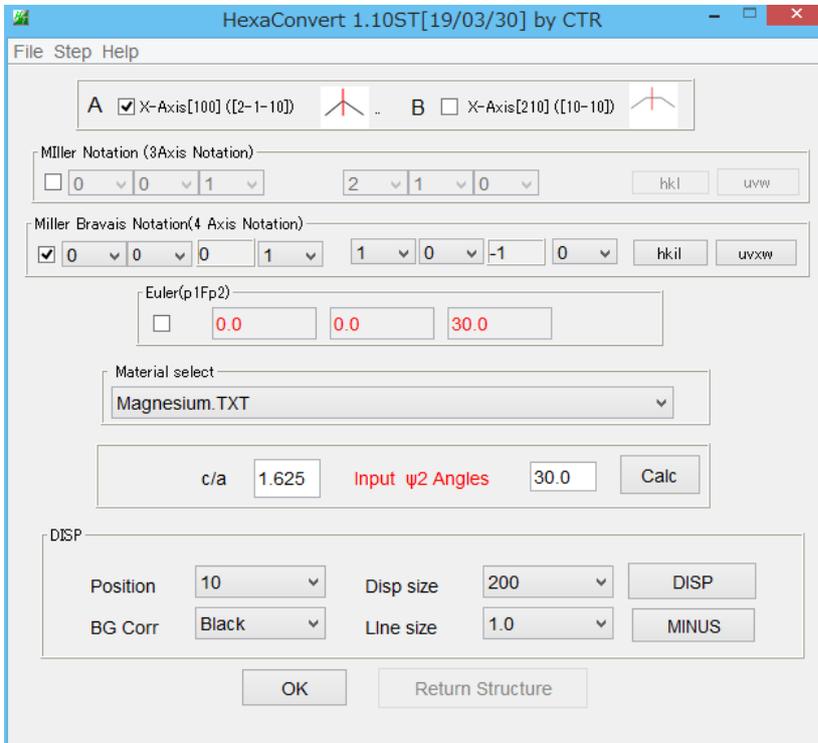
を確認



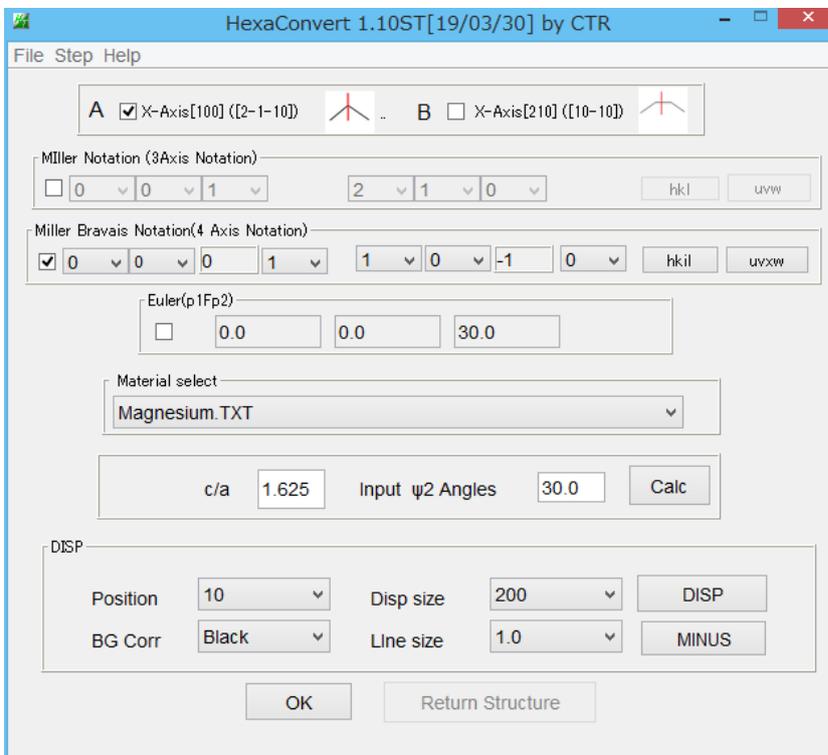
4 軸で(0001)[10-10]を計算した場合、Euler 角度は (0, 0, 0) であり
3 軸表記では(001)[210]である事分かります。



B->A に変更して c a l c

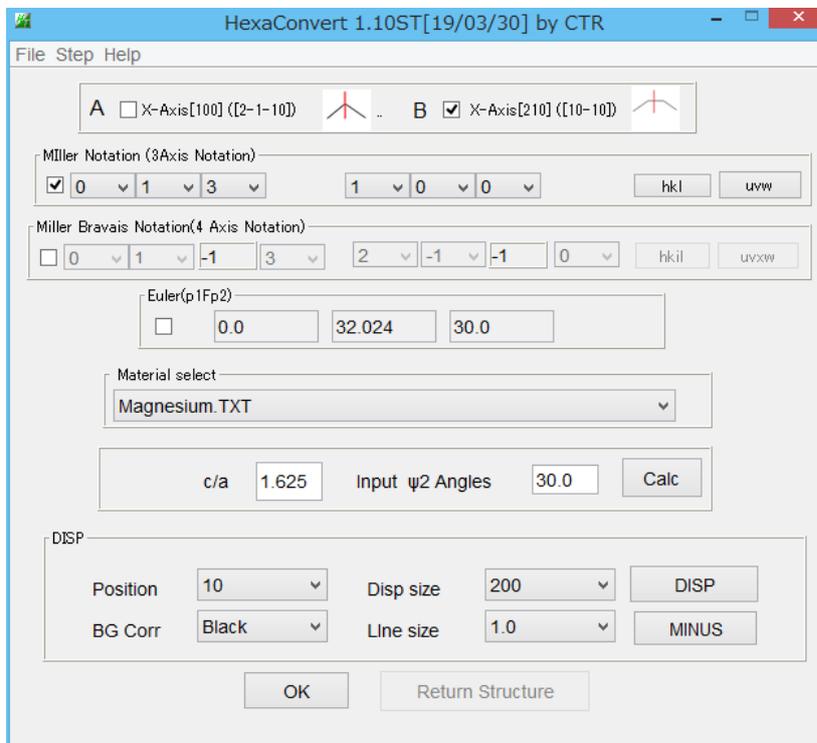
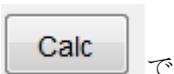
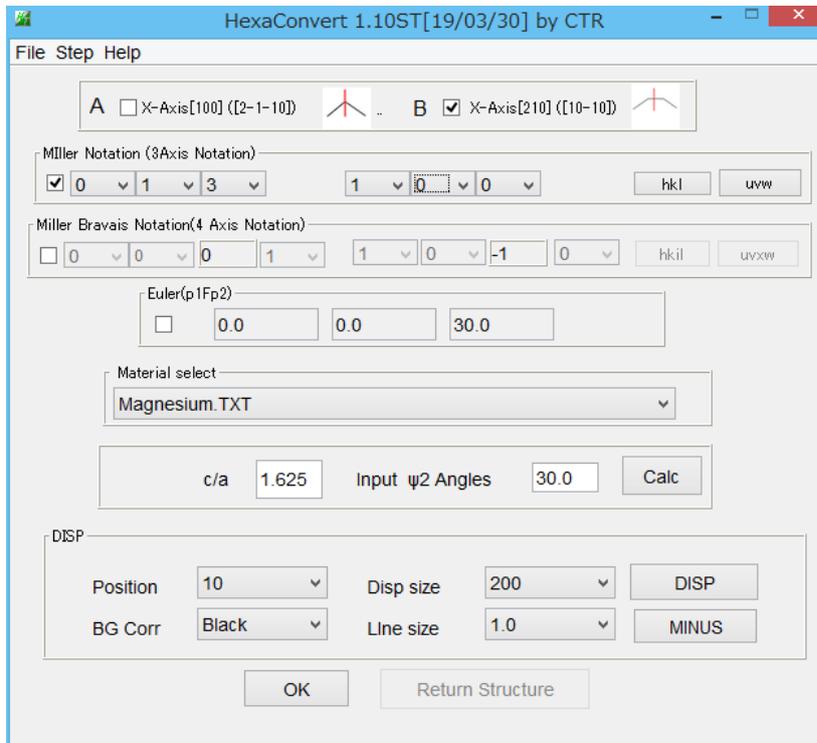


Input ψ_2 Angles 30.0 Calc で確認



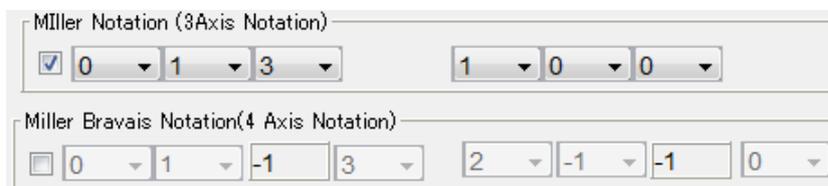
である事が分かります。

6. 2(01-13)[2-1-10]の場合



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。



7. Option 機能、h k l、u v w の l i s t 表示

Miller Notation (3 Axis Notation)

0 1 3 1 0 0 hkl uvw

hkl で <100> に対する {hkl} の list を表示 uvw で {013} に対する <uvw> を表示

{0 -15 -14}<1 0 0>
{0 -15 -13}<1 0 0>
{0 -15 -11}<1 0 0>

{0 1 3}<-15 -12 4>
{0 1 3}<-15 -6 2>
{0 1 3}<-15 -3 1>

{0 1 -2}<1 0 0>
{0 1 -1}<1 0 0>
{0 1 0}<1 0 0>
{0 1 1}<1 0 0>
{0 1 2}<1 0 0>

{0 1 3}<1 -6 2>
{0 1 3}<1 -3 1>
{0 1 3}<1 0 0>
{0 1 3}<1 3 -1>
{0 1 3}<1 6 -2>

{0 15 11}<1 0 0>
{0 15 13}<1 0 0>
{0 15 14}<1 0 0>

{0 1 3}<15 3 -1>
{0 1 3}<15 6 -2>
{0 1 3}<15 12 -4>

Miller Bravais Notation (4 Axis Notation)

0 1 -1 3 2 -1 -1 0 hkil uvxw

同様に hkil で {hkil} に対する <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 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

Euler(p1Fp2)

90 24.6 30.0

Material select
Titanium.TXT

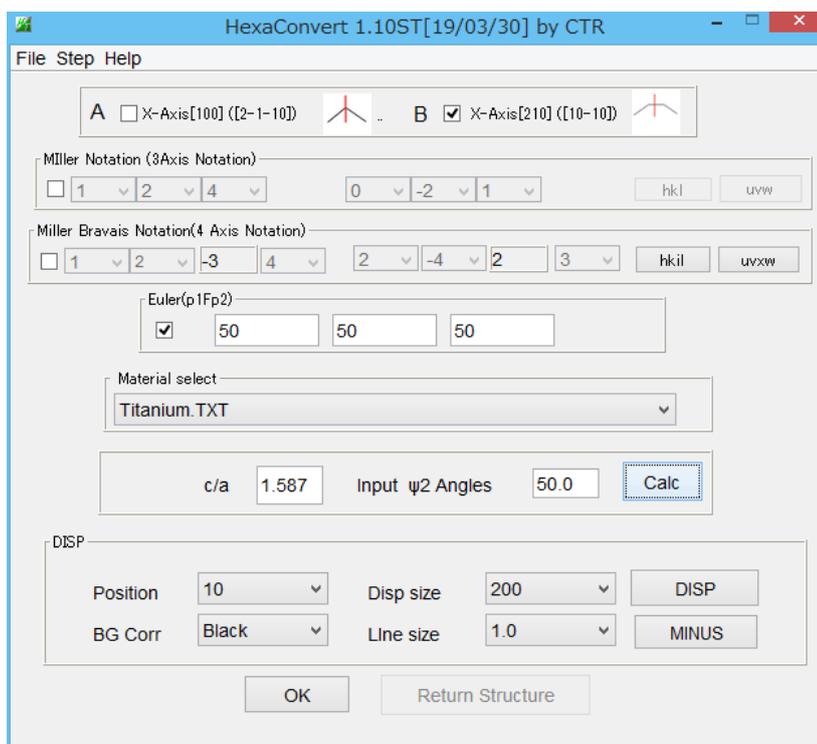
c/a 1.587 Input ψ 2 Angles 30.0 Calc

Euler 角度を入力し、Calc で 3 指数、4 指数表記計算を行う。

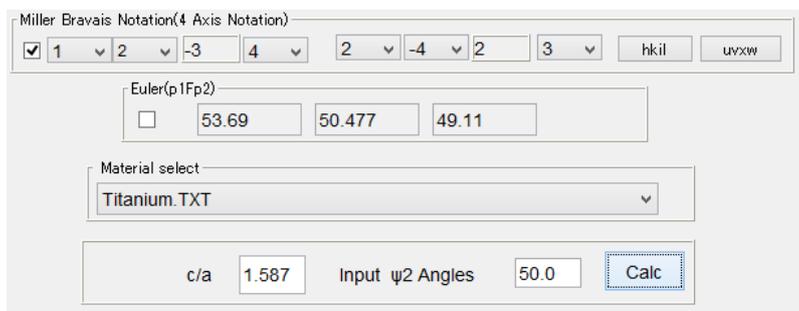
Euler 角度入力では本来、実数の MillerIndices が計算されるが、整数の MillerIndices では

Euler 角度と一致しない。

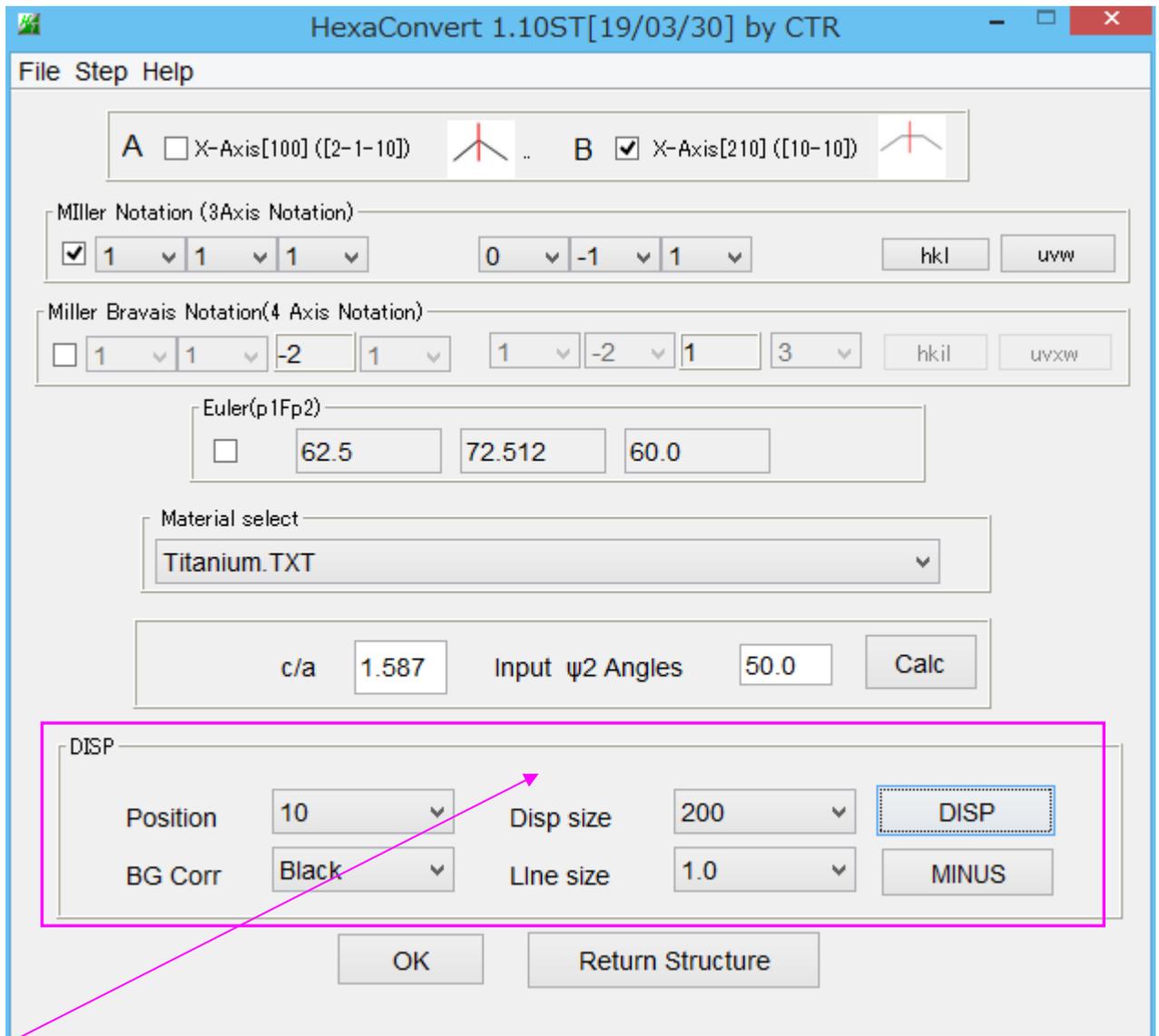
例えば、Euler 角度{50,50,50}で計算した MillerIndices は以下であるが、



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



9. Disp3DTriclinic2との連動



Calc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

Disp size は、表示画面のサイズ

BG Corr は、表示画面のバックグラウンドの色、黒と白の選択

Linesize は、表示画面に使用している線幅

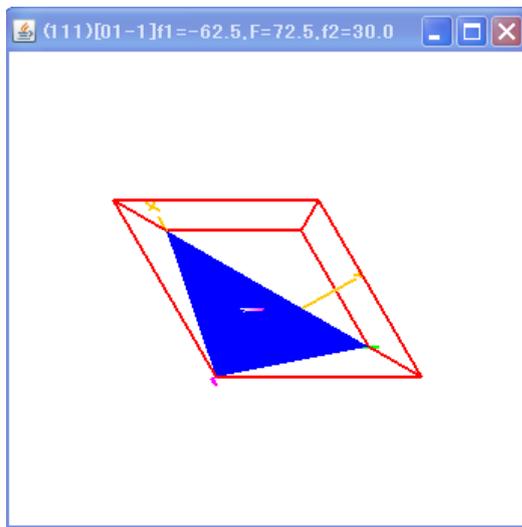


A,Bの選択で、Atype と Btype の表示切り替え

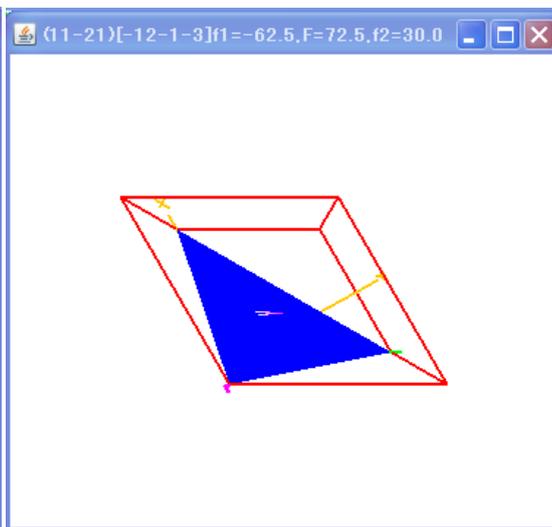


3指数、4指数を切り替える。

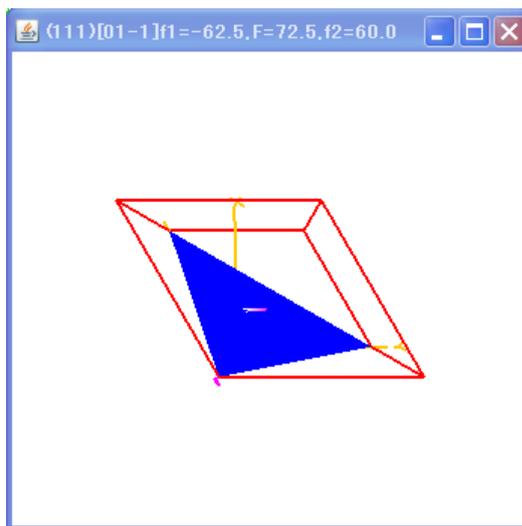
Atype の 3 指数



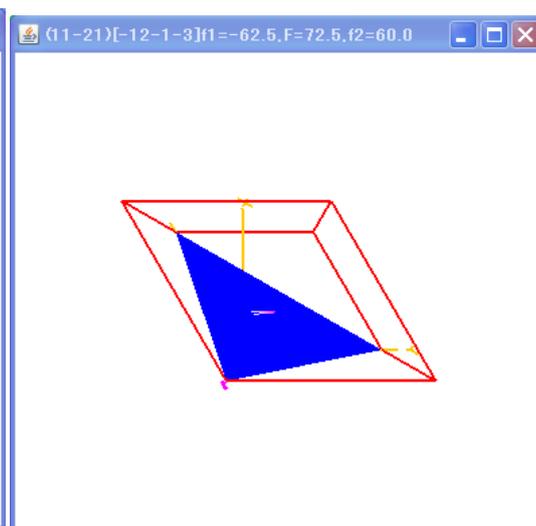
Atype の 4 指数



Btype の 3 指数



Btype の 4 指数



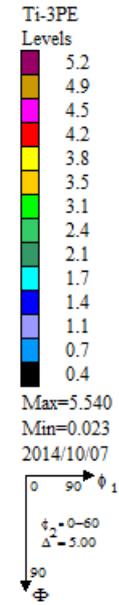
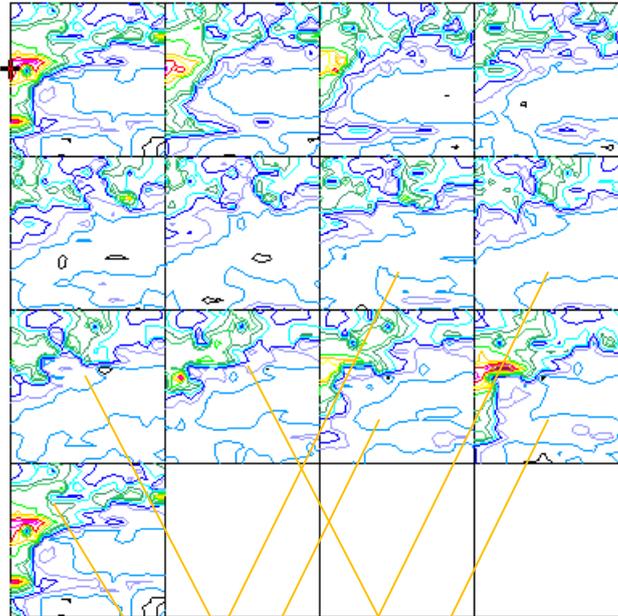
変わるのは、X 軸と Y 軸、A と B で ϕ 2 Euler 角度である。

Atype と Btype の Euler 角度 ϕ_2 に関して



Approx. Miller Indices	Euler Angles
$\begin{bmatrix} -1 & 2 & 4 \\ 1 & 1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.00, 38.43, 0.00 \\ 0.00, 38.43, 60.00 \end{bmatrix}$

$(-124)[210]$
 $(-12-14)[10-10]$

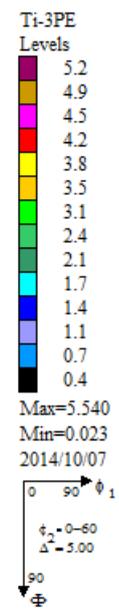
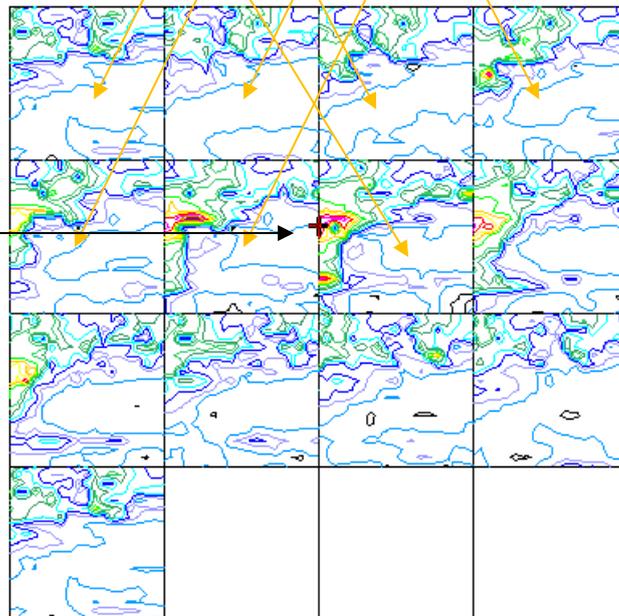


$(114)[1-10]$
 $(11-24)[1-100]$



Approx. Miller Indices	Euler Angles
$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.00, 38.43, 30.00 \end{bmatrix}$

$(114)[1-10]$
 $(11-24)[1-100]$



Btype \rightarrow Atype

Euler 角度 ϕ_2 に関して

Atype = Btype - 30 である。

本ソフトウェアで確認

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]) .. B X-Axis[210] ([10-10])

Miller Notation (3Axis Notation)
 [-1] [2] [4] [2] [1] [0] hkl uvw

Miller Bravais Notation(4 Axis Notation)
 [-1] [2] [-1] [4] [1] [0] [-1] [0] hkil uvxw

Euler Angle(fai1,FAI,fai2)
 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]) .. B X-Axis[210] ([10-10])

Miller Notation (3Axis Notation)
 [1] [1] [4] [1] [-1] [0] hkl uvw

Miller Bravais Notation(4 Axis Notation)
 [1] [1] [-2] [4] [1] [-1] [0] [0] hkil uvxw

Euler(p1Fp2)
 0.0 38.432 60

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)
 [1] [1] [4] [1] [-1] [0] hkl uvw

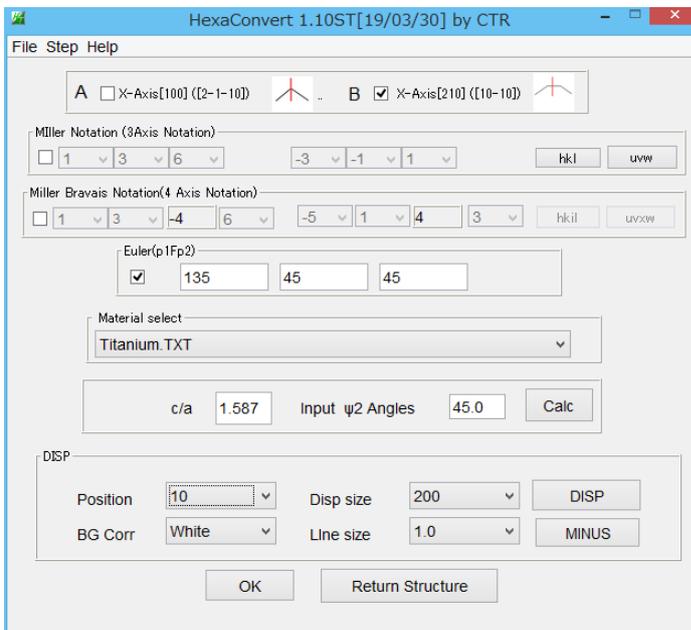
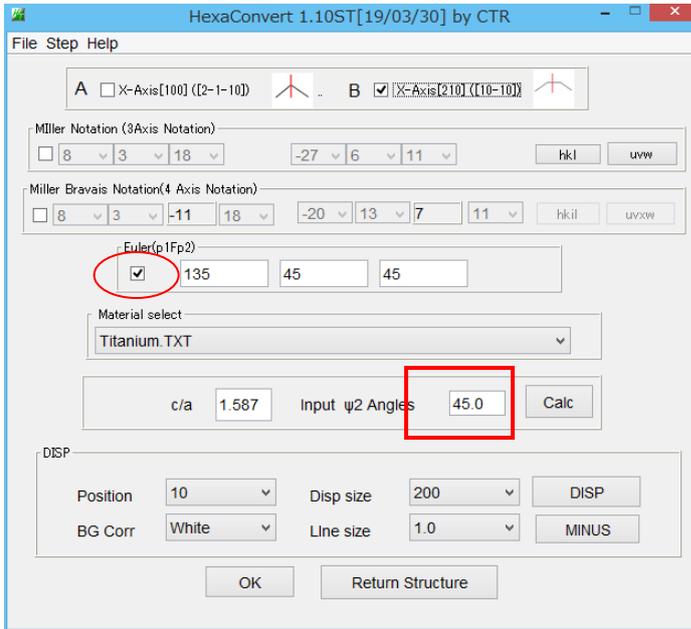
Miller Bravais Notation(4 Axis Notation)
 [1] [1] [-2] [4] [1] [-1] [0] [0] hkil uvxw

Euler(p1Fp2)
 0.0 38.432 30

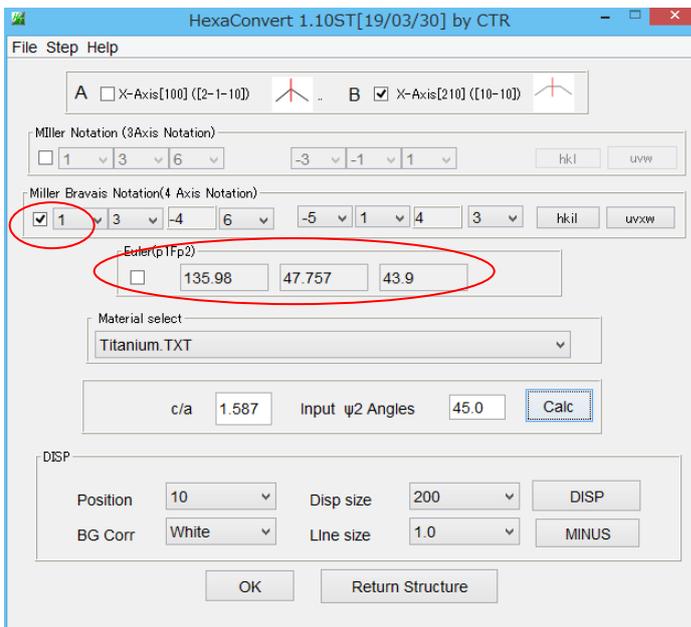
Material select
Titanium.TXT

c/a 1.587 Input ψ2 Angles 30.0 Calc

10. $\phi 1$ が90度以上の場合



(135,45,45)から(13-46)[-5143]が
得られる

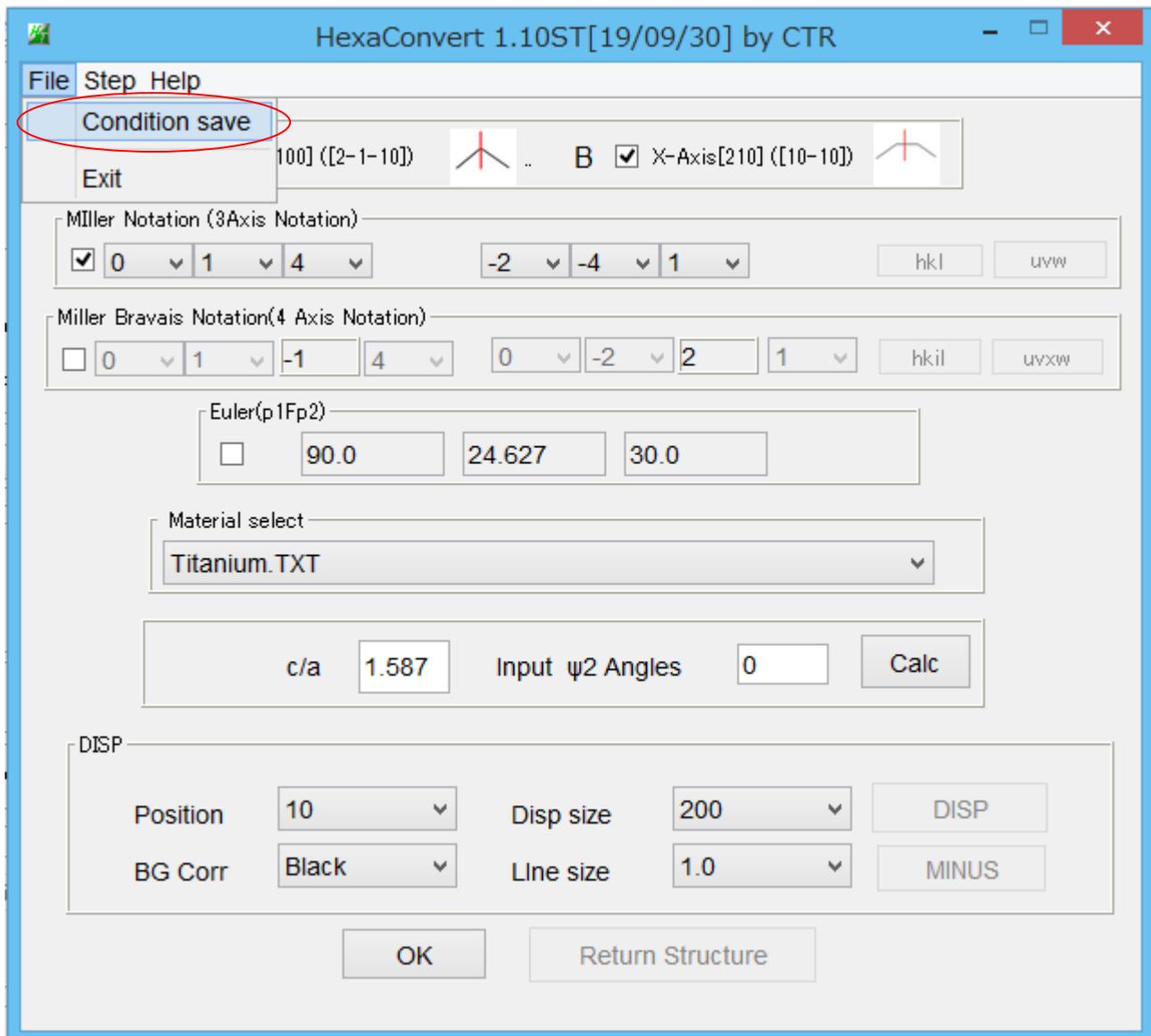


(13-46)[-5143]から
(135.61,47.757,43.9)が計算されます

1.1. 繰り返し同一データの使用

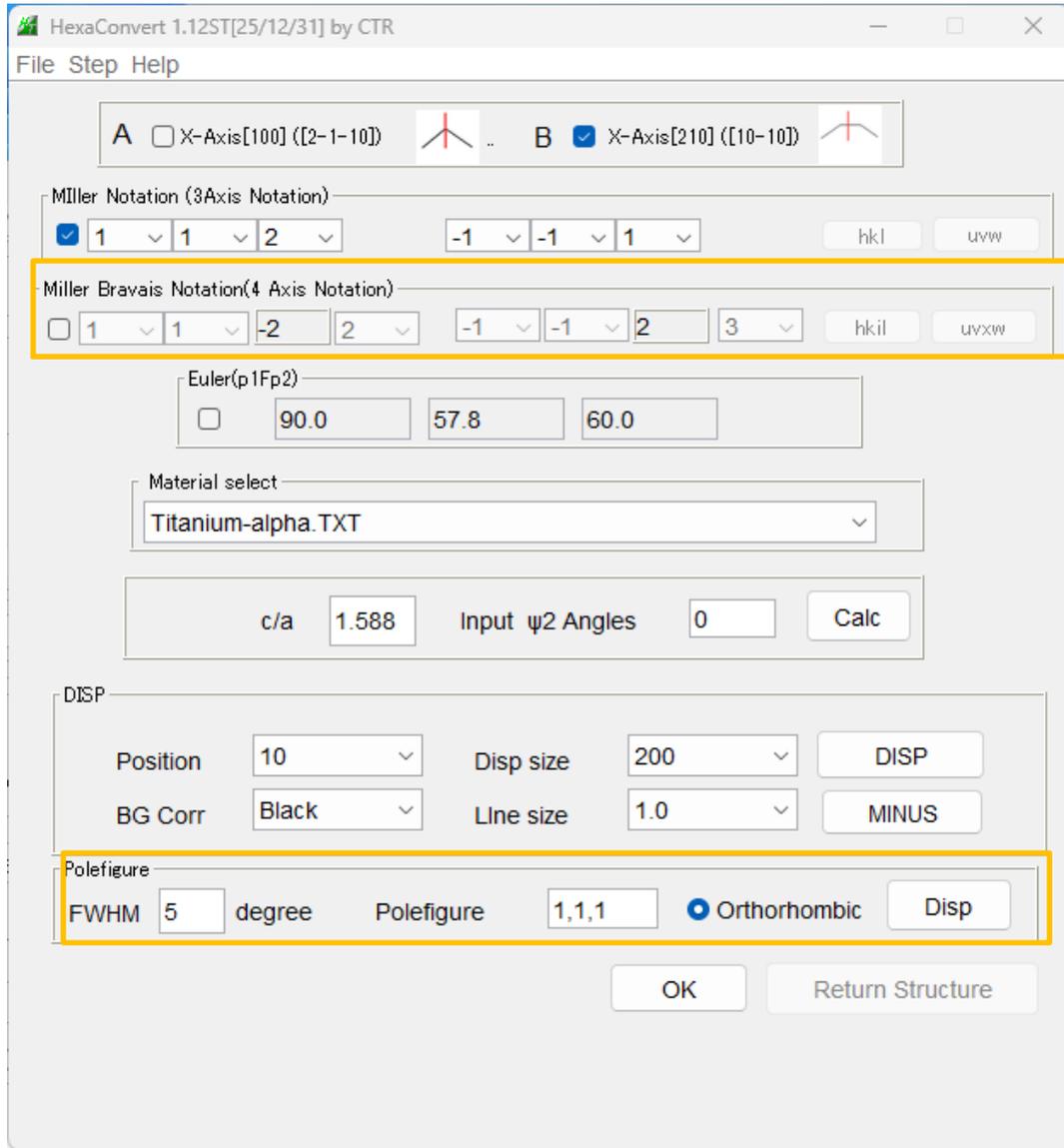
GPODFDisplayなどで使用する場合、同一物質画面が必要になります。

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。

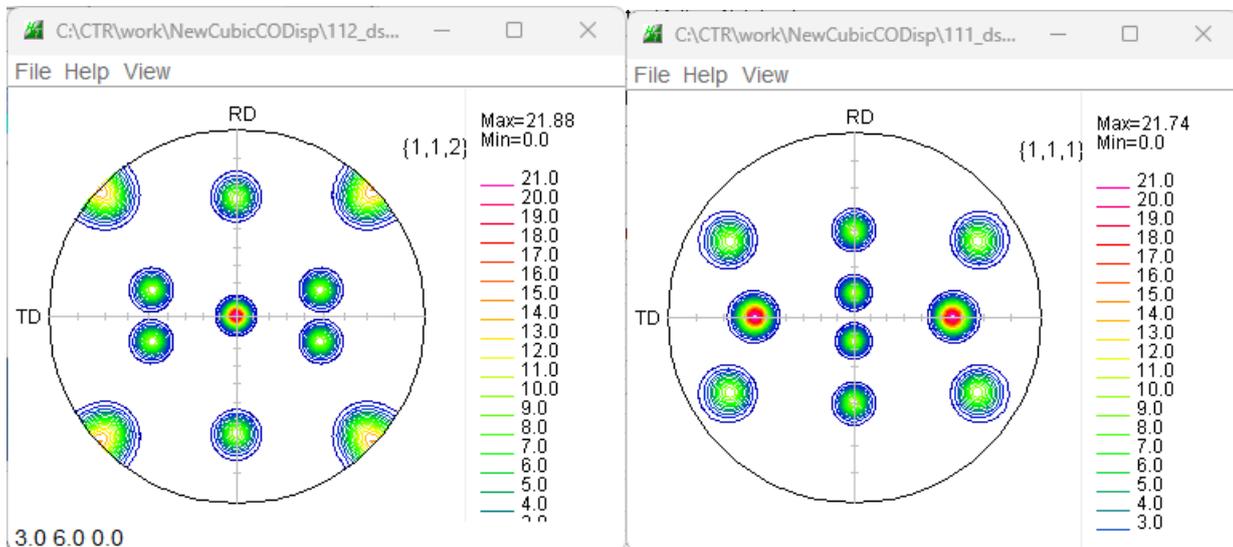


12. 極点図の create

方位から極点図の作成を行う。



極点図 create

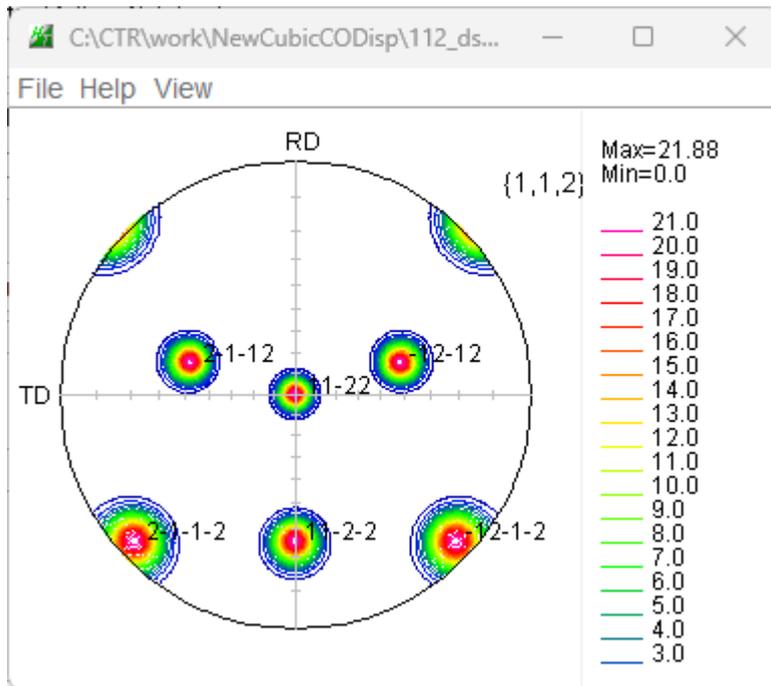


12.1 Hexagonalの対称性

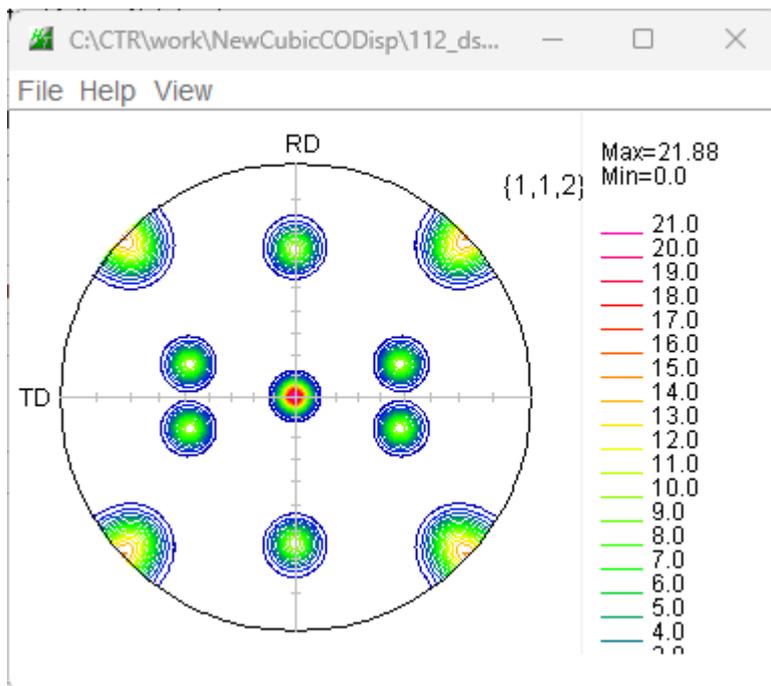
Hexagonalでは、3指数と4指数表現があるが、対称性を考えると4指数が適している。

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 l) [u v t w] から (H K L) [U V W] 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、

C:\CTR\work\NewCubicCODispホルダに保存されます。

Calcで削除されます。