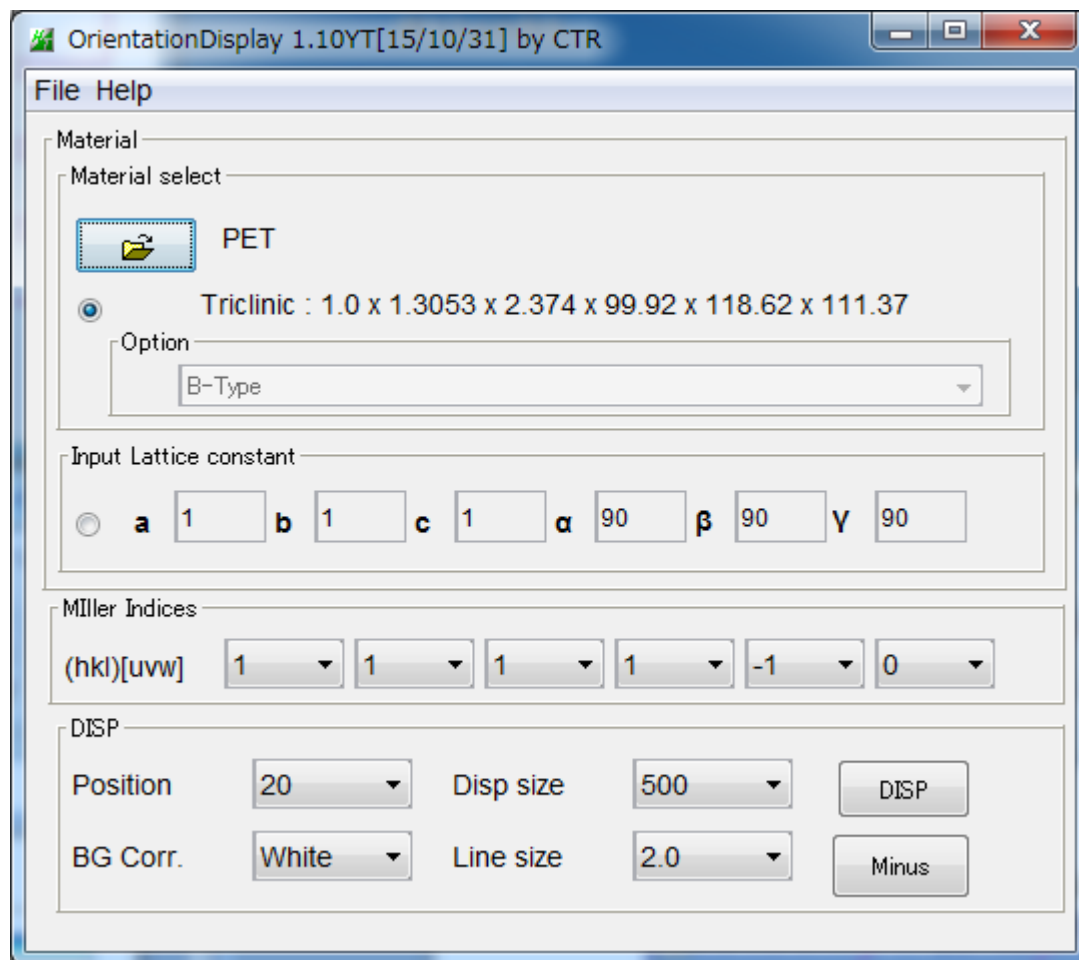


結晶方位図 $\{h k l\} \langle u v w \rangle$ 表示

O r i e n t a t i o n D i s p l a y ソフトウェア

Ver1.10M



2016年09月08日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

* @version 1.0

* Version 1.02 2013/02/04 Disp3DMonoclinic に変更

* Version 1.03 2013/02/08 Triclinic 追加

* Version 1.04 2013/02/08 hkl minus 対応

* Version 1.05 2013/02/13 Lattice constant input

* Version 1.06 2013/02/19 Hexagonal minusIndex を Disp3DTriclinic2 で

* Version 1.07 2013/11/01 データ選択画面が 2 回出てしまう処理

* Version 1.08 2014/01/09 画面変更と初期値を $\{0\ 0\ 1\} <1\ 0\ 0>$ とした

* Version 1.09 2014/10/05 Hexagonal の表示も Disp3DTriclinic2 に変更

* version 1.10 2015/01/10 最大指数 9 9、 $\{H,k,l\}<u,v,w>$ 表示

概要

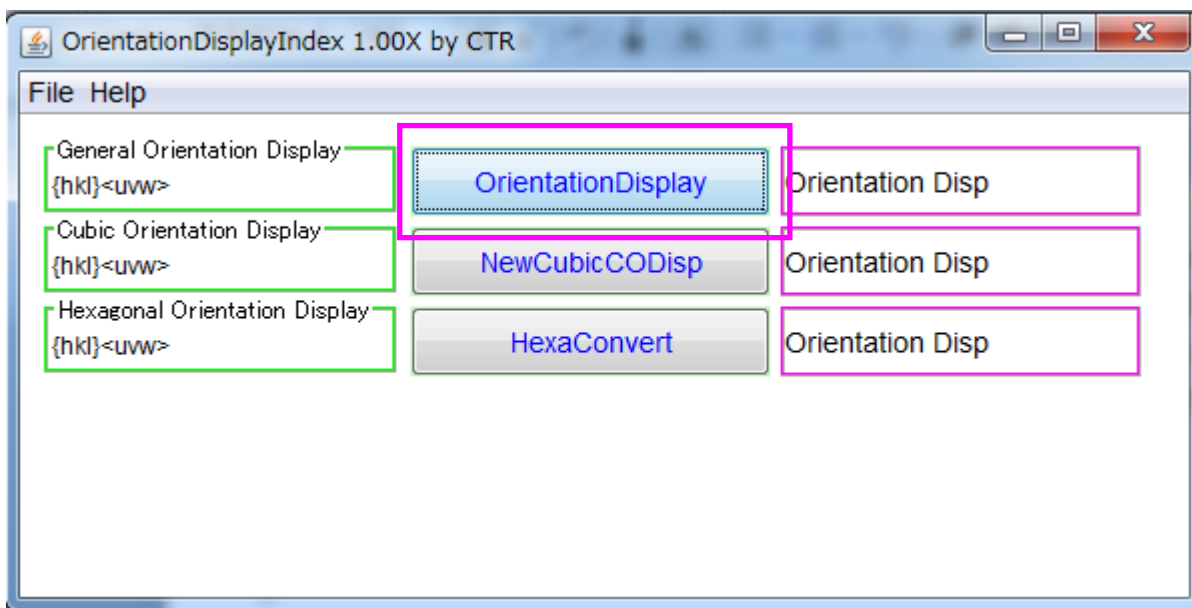
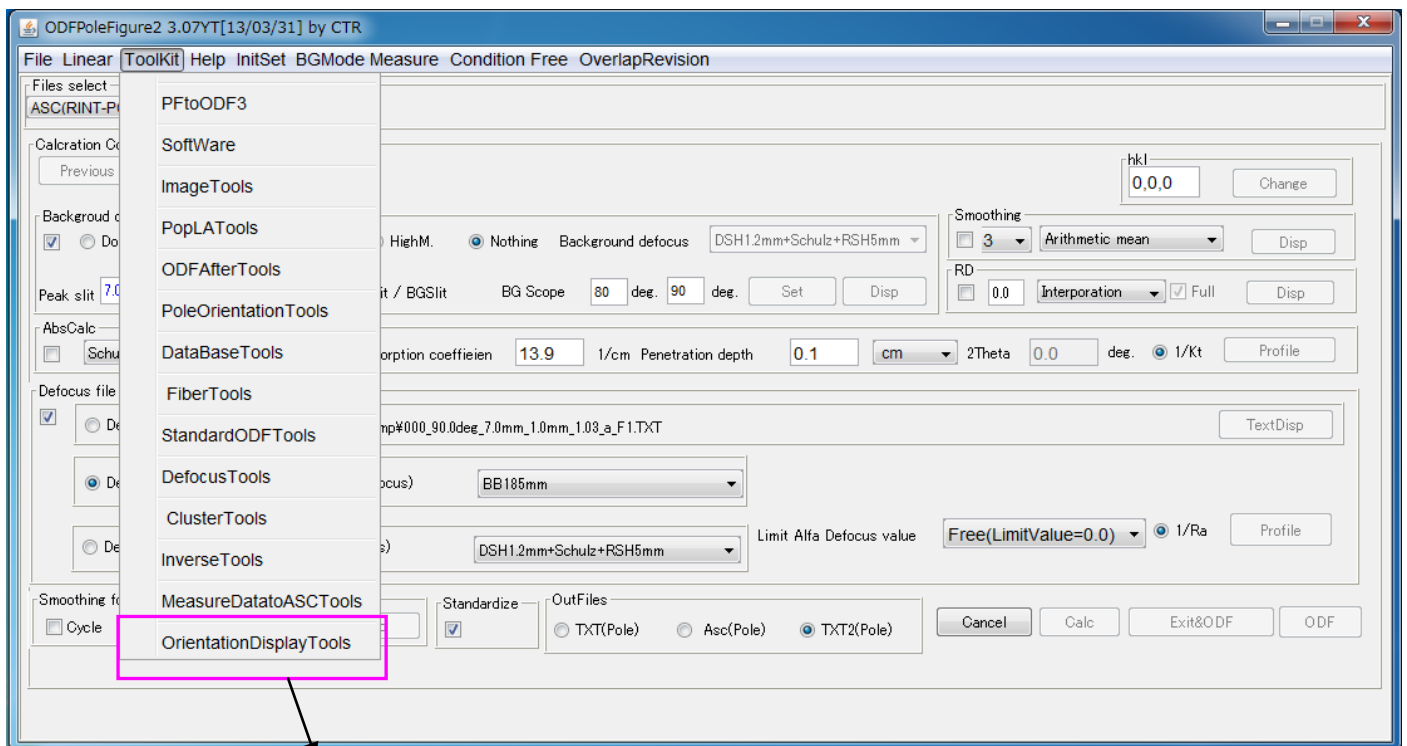
材料面と圧延方向に対する結晶面と結晶方向を $\{h k l\} \langle u v w \rangle$ で表したのが結晶方位であるが、この $\{h k l\} \langle u v w \rangle$ を最小結晶単位胞内に表示するソフトウェアとして作成されています。

立方晶はNewCubicCODisp、六方晶はHexaConvertがあるが、結晶系の異なる材料に対し、3指数入力で同一フレームから操作できるよう作成した。

プログラムの起動

C:\¥CTR¥bin¥OrientttonDisplay.jar から起動

ODFPoleFigure2 ソフトウェアの ToolKit から OrientationDisplayTools を選択し
OrientationDisplay で起動



NewCubicCODisp ソフトウェアは Euler 角度 $\rightarrow (hkl)[uvw]$ がサポートされています。

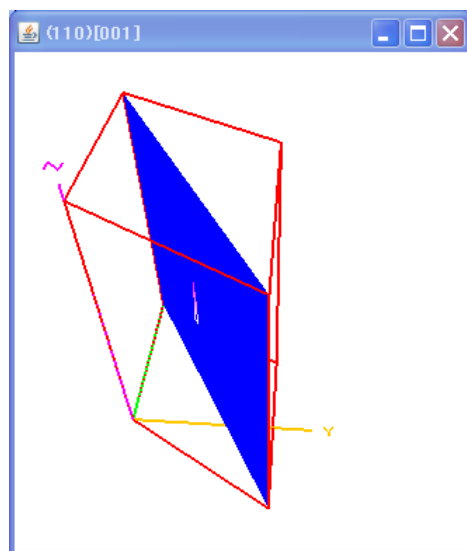
NexaConvert ソフトウェアは 4 指数入力がサポートされています。

材料の選択 および手入力

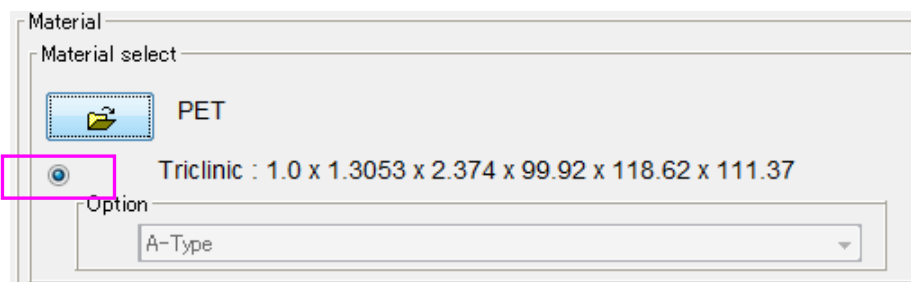
{h k l} <u v w>の入力

表示パラメータ入力と表示

マイナスh k lが含まれる場合



材料の選択と手入力の切り替え



Material

Material select

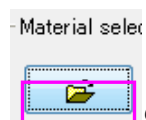
 PET

☒ Triclinic : 1.0 x 1.3053 x 2.374 x 99.92 x 118.62 x 111.37

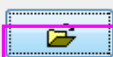
Option

A-Type

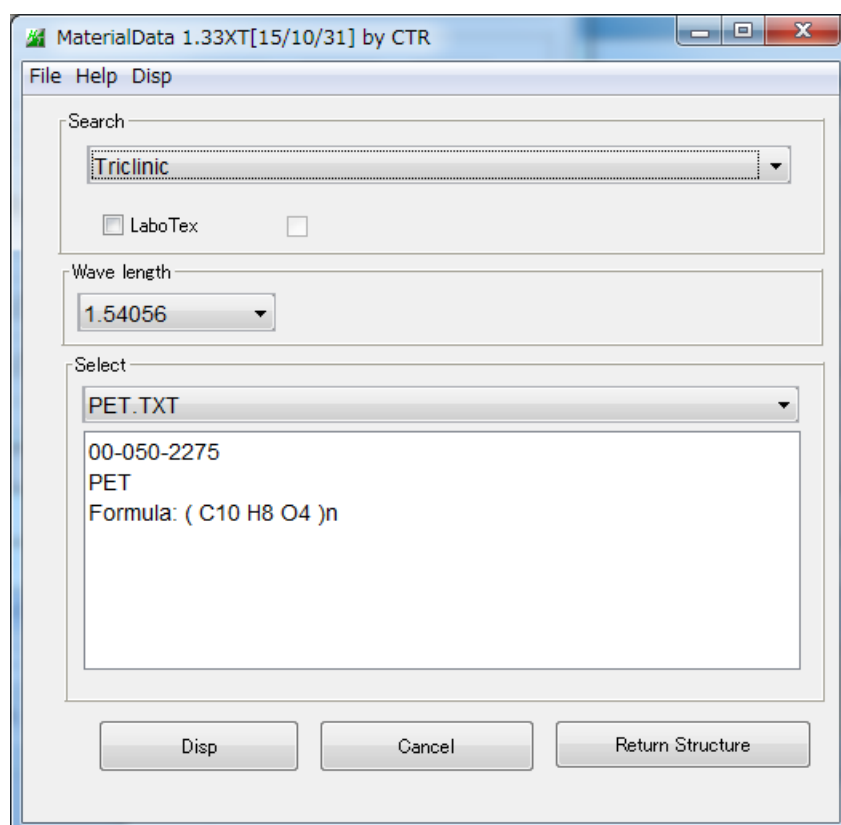
材料の選択



Material select



の操作でMaterialDataを表示



MaterialData 1.33XT[15/10/31] by CTR

File Help Disp

Search

Triclinic

☐ LaboTex ☐

Wave length

1.54056

Select

PET.TXT

00-050-2275

PET

Formula: (C10 H8 O4)n

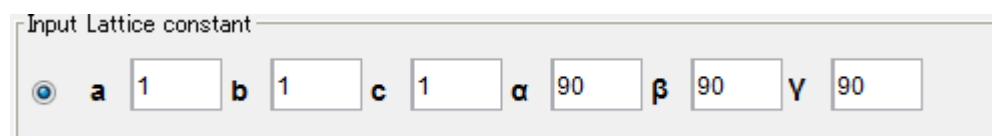
Disp Cancel Return Structure

結晶系と材料を選択し

Return Structure

で選択を反映させる。

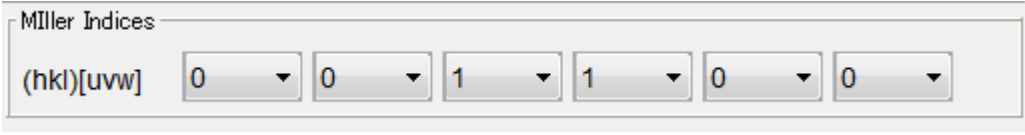
格子定数の手入力



Input Lattice constant

☒ a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 γ 90

{ h k l } < u v w > の指定



Miller Indices

(hkl)[uvw] 0 0 1 1 0 0

This panel contains a title bar 'Miller Indices' and a row of six dropdown menus. The first dropdown is labeled '(hkl)[uvw]' and the others are empty. The values shown in the dropdowns are 0, 0, 1, 1, 0, and 0 respectively.

以下の条件を満足すると、D i s p が可能になります。

$$h*u+k*v+l*w=0$$

マイナス指数入力が可能

結晶系

全ての結晶系に対応してます。

結晶方位表示は

D i s p 3 D T r i c l i n i c 2 (Ver1.00) マイナス指数表示可能

D i s p 3 D H e x (Ver1.400)

を使用しています。

表示画面パラメータ



DISP

Position 20 Disp size 500 DISP

BG Corr. White Line size 2.0 Minus

This panel has a title bar 'DISP'. It contains four dropdown menus: 'Position' (value 20), 'Disp size' (value 500), 'BG Corr.' (value White), and 'Line size' (value 2.0). There are two buttons: 'DISP' and 'Minus'.

Disp Size は、3 D 表示の視点を換えられます。

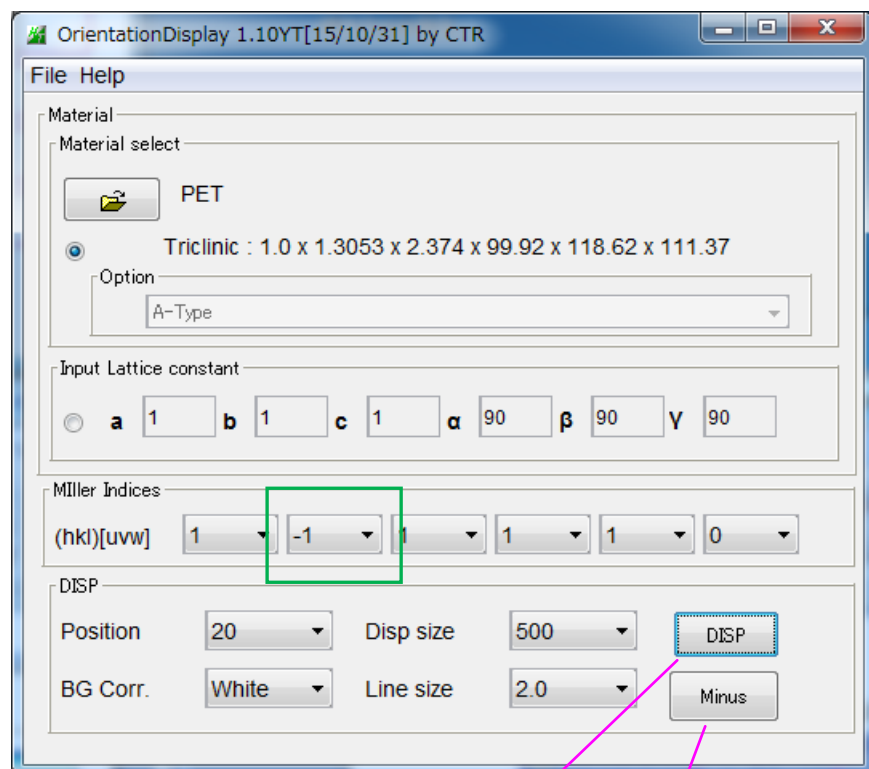
大きくすると、視点が離れるので遠近感が少なくなります。

表示画面操作

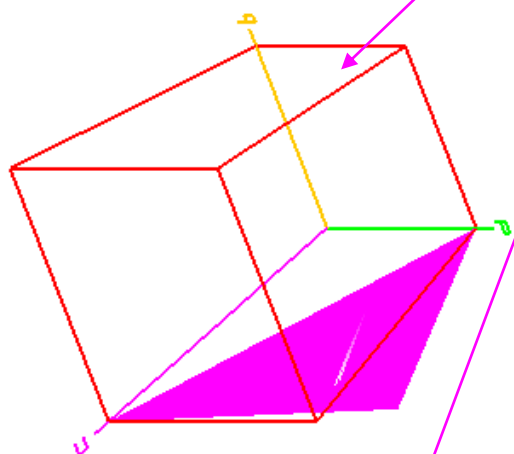
マウスをグリグリして下さい。左右上下移動、回転操作

視点を離すのは、マウスセンターボタンを押したまま、マウス前後

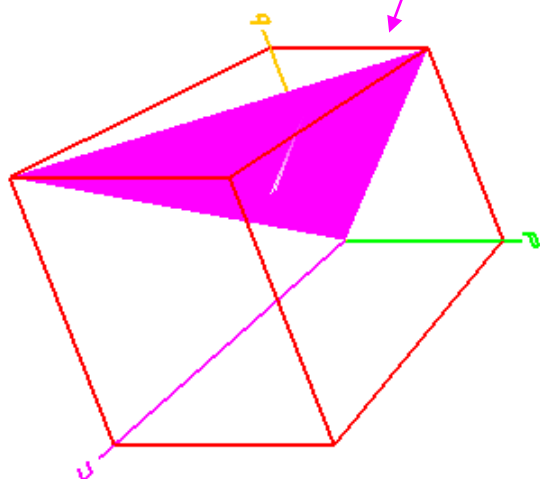
Hexagonal 以外



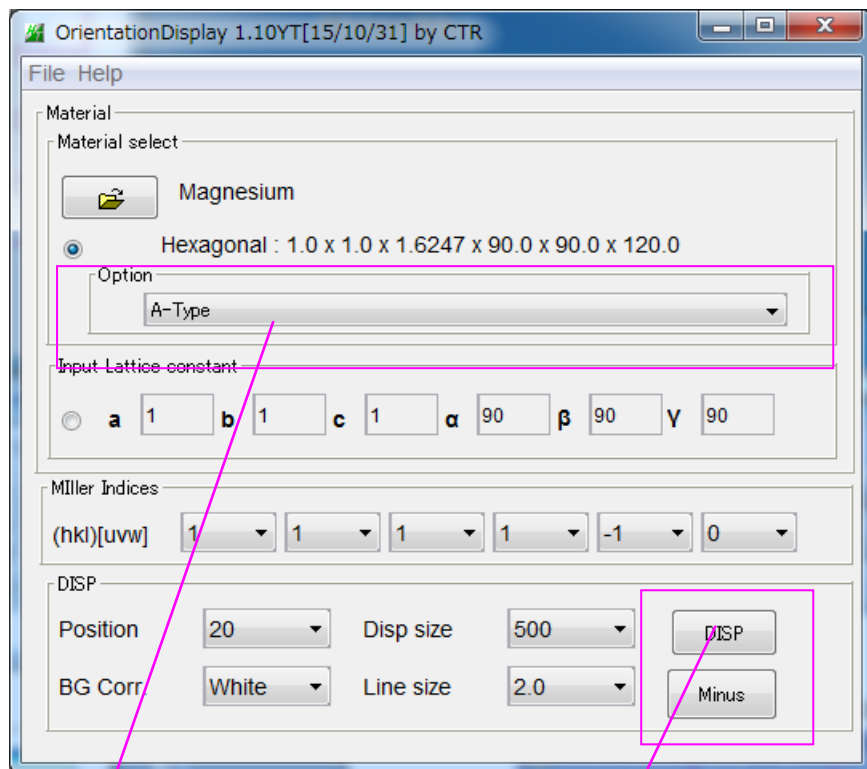
マイナス h k l が含まれると単位セルからはみ出ます。



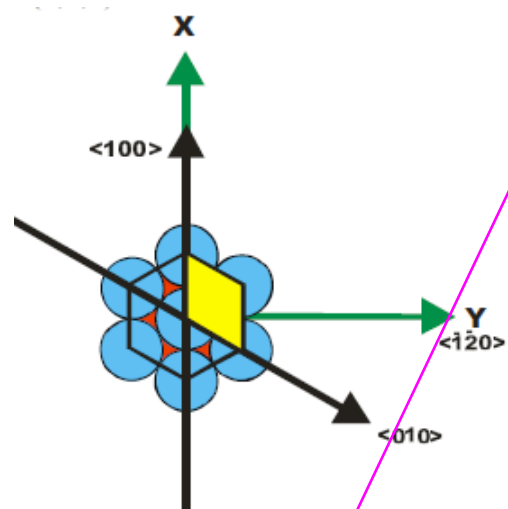
Minus 操作で、単位セルに移動します。



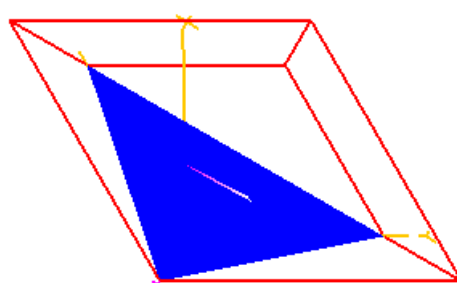
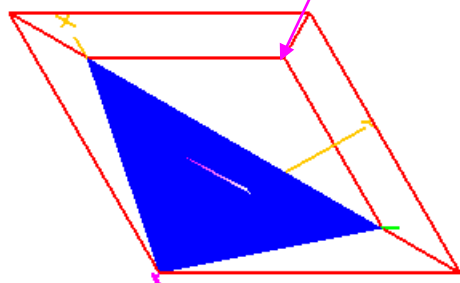
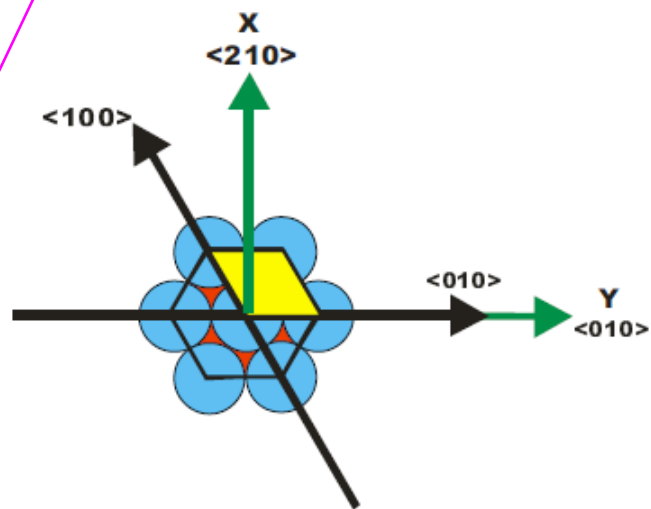
Hexagonalの場合



A-Type Disp3DHex



B-Typeの選択 Disp3DHex



Disp3DTriclinic2 ではマイナス指数に対応

Orthorhombic (Polyethylene)

a 軸－b 軸面を基本とした場合

PolyethyleneDISP

Orthorhombic

7.4 (1.0)

4.93 (0.6662)

2.54 (0.3432)

90.0

90.0

90.0

1.54056

9

1 1 0 100.0

2 0 0 35.0

2 1 0 5.0

0 2 0 20.0

0 1 1 25.0

3 1 0 20.0

1 1 1 20.0

2 2 0 15.0

3 1 1 25.0

21.642

24.032

30.175

36.418

39.893

40.875

41.792

44.109

55.095

a 軸－c 軸面を基本とした場合 (LaboTex)

PolyethyleneDISP

Orthorhombic

2.54 (1.0)

4.93 (1.9409)

7.4 (2.9134)

90.0

90.0

90.0

1.54056

9

0 1 1 100.0

0 0 2 35.0

0 1 2 5.0

0 2 0 20.0

1 1 0 25.0

0 1 3 20.0

1 1 1 20.0

0 2 2 15.0

1 1 3 25.0

21.642

24.032

30.175

36.418

39.893

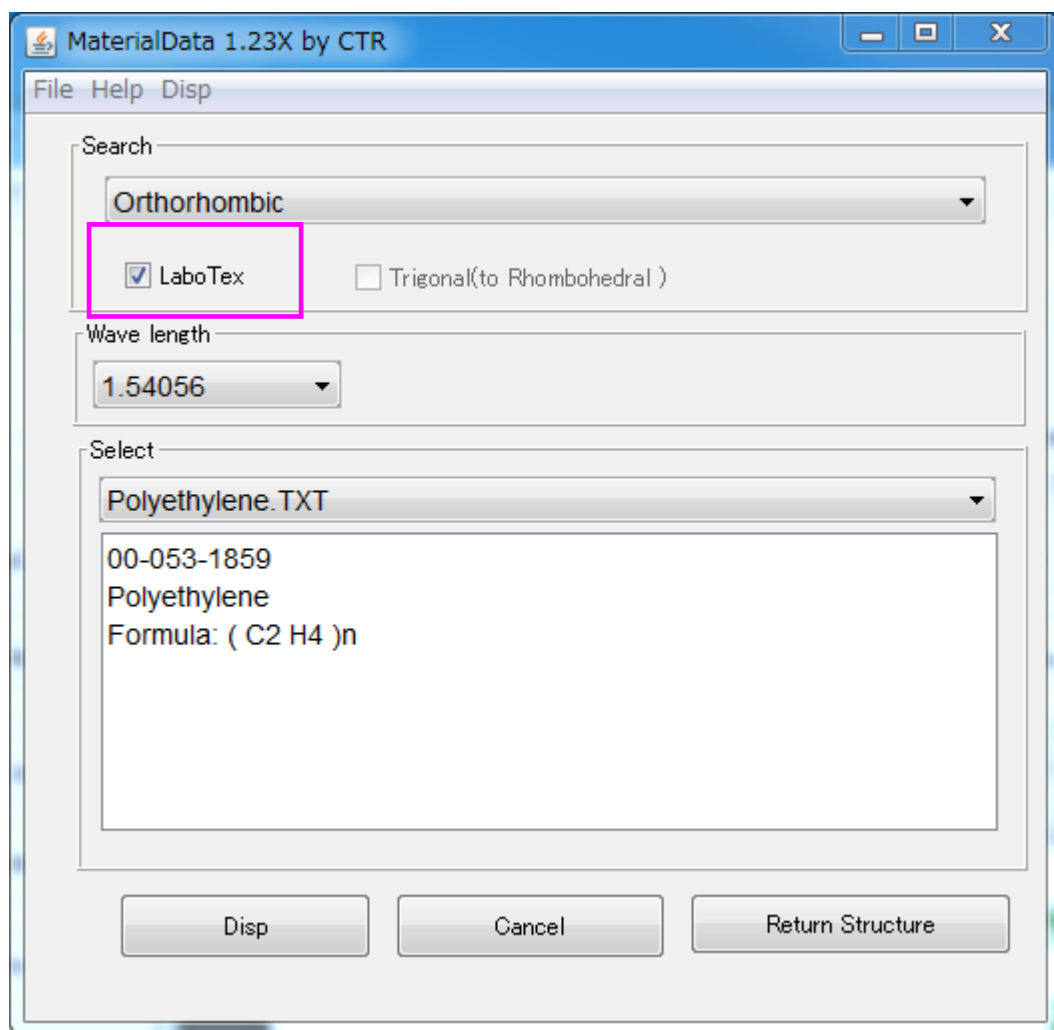
40.875

41.792

44.109

55.095

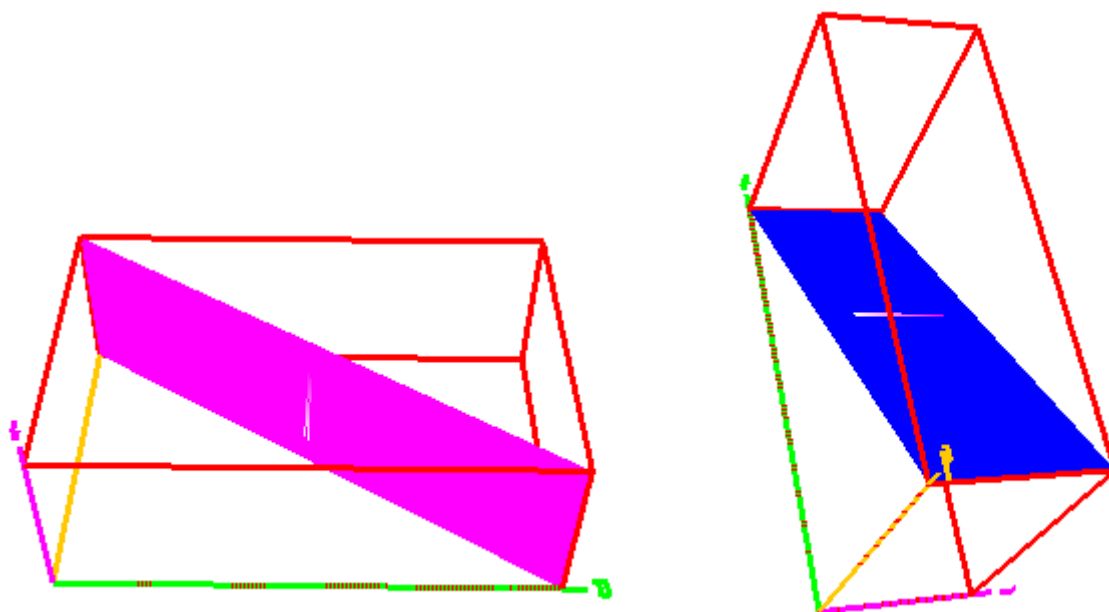
材料選択画面で選択を行う。



(1 1 0) [0 0 1] と L a b o T e x タイプの (0 1 1) [1 0 0] を比較

Miller Indices($h \geq 0$ $k \geq 0$ $l \geq 0$)

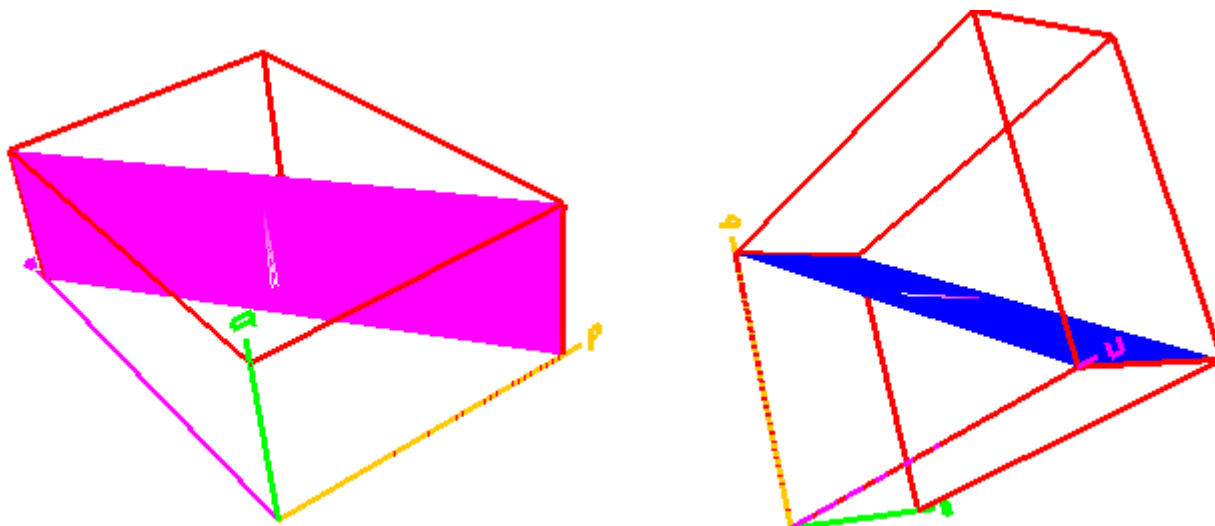
(hkl)[uvw] 1 1 0 0 0 1



L a b o T e x で表示

Miller Indices($h \geq 0$ $k \geq 0$ $l \geq 0$)

(hkl)[uvw] 0 1 1 1 0 0



軸が入れ替わって表示されるが、同一な面である事が分かります。

Monoclinic (α -Polypropylene)

a 軸－b 軸面を基本とした場合

a 軸－c 軸面を基本とした場合 (LaboTex)

α -PolypropyleneDISP

Monoclinic

6.63 (1.0)

20.78 (3.1342)

6.5 (0.9804)

90.0

99.5

90.0

1.54056

145

0 2 0 2.6 8.503

1 0 0 1.2 13.53

1 1 0 100.0 14.187

0 4 0 54.0 17.054

1 3 0 71.4 18.645

-1 2 1 2.3 19.656

1 1 1 36.9 21.364

-1 3 1 70.4 21.877

1 2 1 1.8 22.626

α -PolypropyleneDISP

Monoclinic

6.5 (1.0)

6.63 (1.02)

20.78 (3.1969)

90.0

90.0

80.5

1.54056

145

0 0 2 2.6 8.503

0 -1 0 1.2 13.53

0 -1 1 100.0 14.187

0 0 4 54.0 17.054

0 -1 3 71.4 18.645

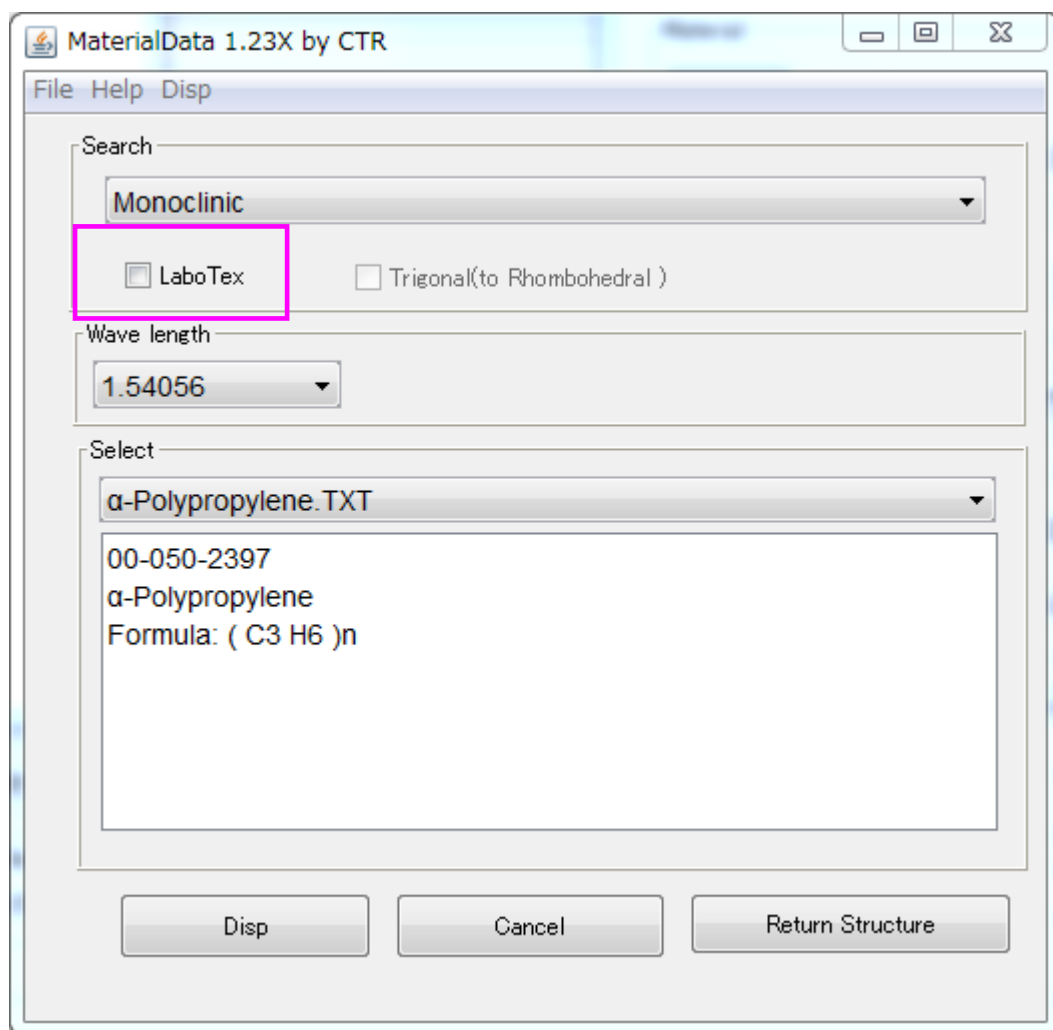
1 1 2 2.3 19.656

1 -1 1 36.9 21.364

1 1 3 70.4 21.877

1 -1 2 1.8 22.626

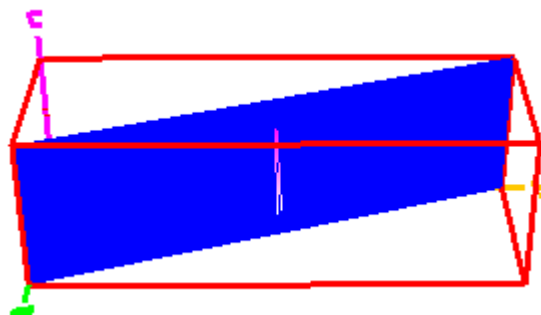
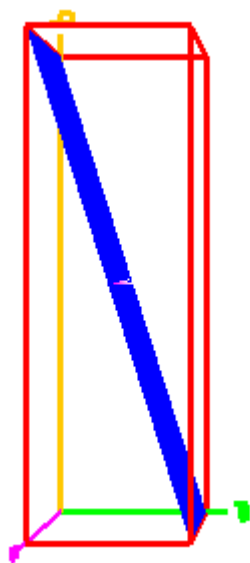
材料選択画面で選択を行う



(1 1 0) [0 0 1] と L a b o T e x タイプの (0 - 1 1) [1 0 0] を比較

Miller Indices($h \geq 0$ $k \geq 0$ $l \geq 0$)

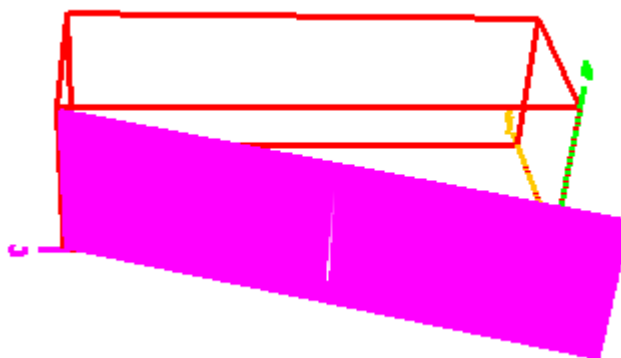
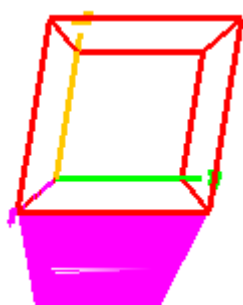
(hkl)[uvw] 1 1 0 0 0 1



L a b o T e x タイプで表示

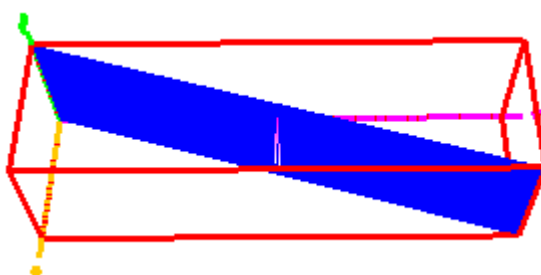
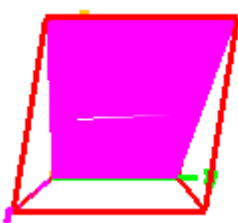
Miller Indices($h \geq 0$ $k \geq 0$ $l \geq 0$)

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



Minus

表示



Triclinic

PETDISP

Triclinic

4.537 (1.0)
5.922 (1.3053)
10.771 (2.374)

99.92

118.62

111.37

1.54056

142

0	-1	1	30.6	16.305	0	-1	1	30.6	16.305
0	1	0	37.0	17.746	0	1	0	37.0	17.746
-1	1	1	21.8	21.463	1	1	1	21.8	21.463
-1	1	0	61.7	22.724	1	1	0	61.7	22.724
0	1	1	13.1	24.122	0	1	1	13.1	24.122
-1	1	2	13.5	24.966	1	1	2	13.5	24.966
1	0	0	100.0	26.114	-1	0	0	100.0	26.114
1	-1	1	25.2	28.149	-1	-1	1	25.2	28.149

PETDISP

Triclinic

4.537 (1.0)
5.922 (1.3053)
10.771 (2.374)

99.92

61.38

68.63

1.54056

142

MaterialData 1.23X by CTR

File Help Disp

Search

Triclinic

☒ LaboTex ☐ Trigonal(to Rhombohedral)

Wave length

1.54056

Select

PET.TXT

00-050-2275
PET
Formula: (C10 H8 O4)n

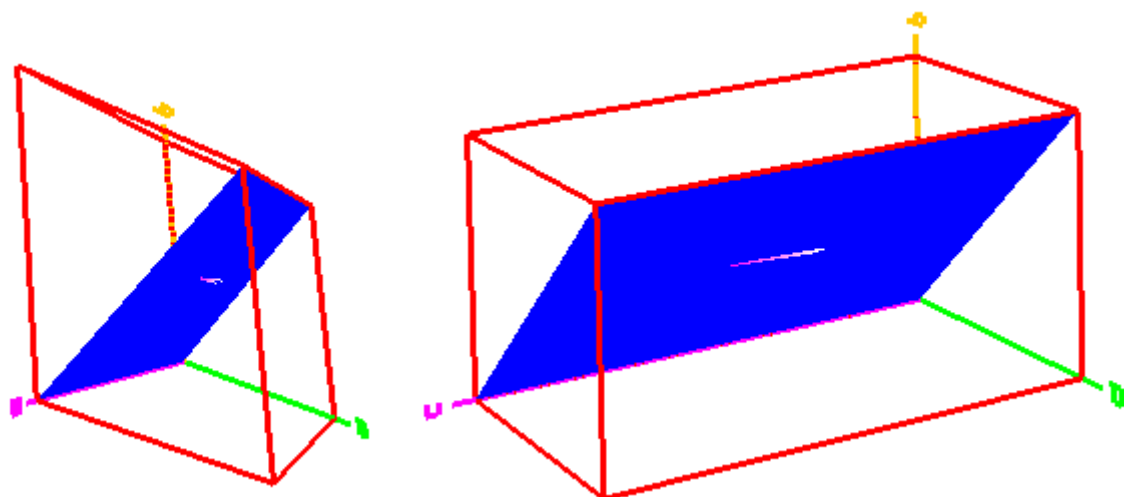
Disp Cancel Return Structure

$(-1\ 1\ 0)$ $[0\ 0\ 1]$ と L a b o T e x タイプの $(1\ 1\ 0)$ $[0\ 0\ 1]$ を比較

Miller Indices($h \geq 0$ $k \geq 0$ $l \geq 0$)

(hkl)[uvw]

Minus



L a b o T e x タイプで表示

Miller Indices($h \geq 0$ $k \geq 0$ $l \geq 0$)

(hkl)[uvw]

