

各種材料の面と面の角度を計算

h k l A n g l e ソフトウェア

Version 1.03M

2023年08月20日



HelperTex Office

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

* @version 1.0 2010-08-08

* Version 1.001 2010-08-10 TxtDisplayExec を修正し、起動できようにした。

* Version 1.002 2010-08-11 Create,Delete は再描画の為、exit()とした。

* Version 1.003 2011-08-16 homedir を c:\¥ctr¥work¥MYICDD とした。create delete を削除

* Version 1.004 2011-08-19 角度計算を I n v e r s e して行う。

*Version 1.03 2025-01-03 Hexagonal 用に 4 指数入力追加

1. 概要
2. 計算式
3. 操作方法
4. 例えば、PETの場合
5. 高分子材料評価をWilchinsky法で解析する場合{0,-1,1}と{0,1,0}面の角度計算は
6. 極点図
7. 逆極点図
9. Version 1.03

1. 概要

(h 1 k 1 l 1) と (h 2 k 2 l 2) の角度を計算するソフトウェア

Excelなどで計算可能であるが、立方晶以外では軸比で角度が異なる。毎回変更するのが煩わしいので、データベースを登録、変更出来る形式のソフトウェアとして作成した。

計算は、全てTriclinicで計算する。

データベースは、CTR¥work¥hklaAngle¥DATAに作成する。

2. 計算式

それぞれの面指数を(h1 k1 l1),(h2 k2 l2)とした場合

$$1/d^2=1/V^2*(S11*h^2+S22*k^2+S33*l^2+2*S12*h*k+2*S23*k*l+2*S13*l*k)$$

$$\cos \phi = d1*d2*(S11*k1*h2+S22*k1*k2+S33*l1*l2+$$

$$S23*(k1*l2+k2*l1)+S13*(l1*k2+l2*h1)+S12*(h1*k2+h2*k2))/V$$

$$V=a*b*c*\sqrt{(1-\cos^2 \alpha -\cos^2 \beta -\cos^2 \gamma +2*\cos \alpha *\cos \beta *\cos \gamma)}$$

$$S11=b^2*c^2*\sin^2 \alpha$$

$$S22=a^2*c^2*\sin^2 \beta$$

$$S33=c^2*b^2*\sin^2 \gamma$$

$$S12=a*b*c^2*(\cos \alpha *\cos \beta -\cos \gamma)$$

$$S23=a^2*b*c*(\cos \beta *\cos \gamma -\cos \alpha)$$

$$S13=a*b^2*c*(\cos \gamma *\cos \alpha -\cos \beta)$$

逆格子変換

$$a^*=bc\sin \alpha /V$$

$$b^*=ac\sin \beta /V$$

$$c^*=ab\sin \gamma /V$$

$$\cos \alpha ^*=(\cos \beta \cos \gamma -\cos \alpha)/(\sin \beta \sin \gamma)$$

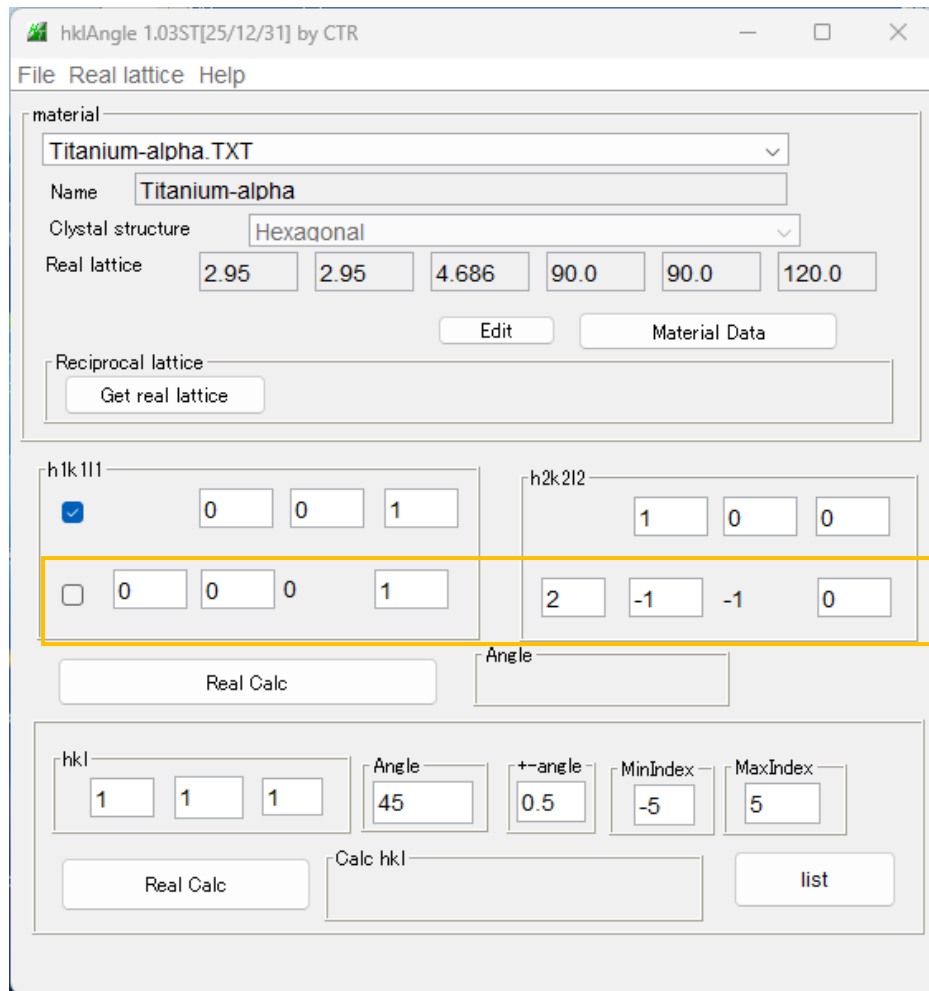
$$\cos \beta ^*=(\cos \gamma \cos \alpha -\cos \beta)/(\sin \gamma \sin \alpha)$$

$$\cos \gamma ^*=(\cos \alpha \cos \beta -\cos \gamma)/(\sin \alpha \sin \beta)$$

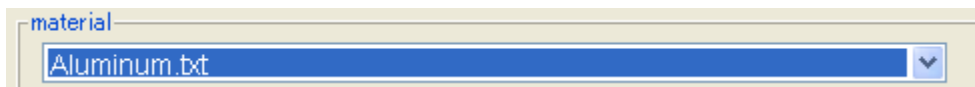
cos φ 計算では、実格子計算と逆格子計算をサポート

3. 操作方法

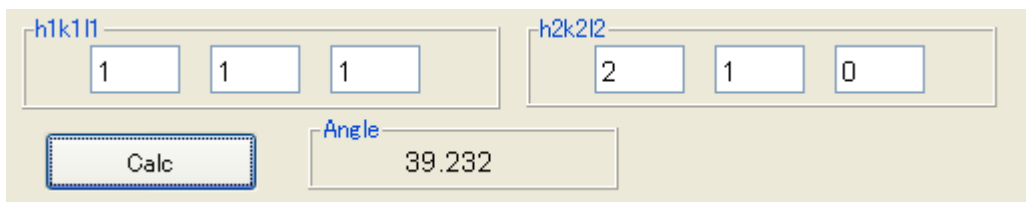
C:\¥CTR¥bin¥hklAngle.jar で起動



Version1.03 で追加



で材料選択



(h 1 k 1 l 1) と (h 2 k 2 l 2) を入力してC a l c で計算

検索

hkl:

Angle:

+del:

MinIndex:

MaxIndex:

Calc list

(h k l) と Angle を入力し、Calc で計算、List で可能性ある (h k l) を表示

TextDisplay 1.001GT by CTR

h	k	l	Angle
1	1	1	39.232
2	2	2	39.232
3	3	3	39.232
4	4	4	39.232
5	5	5	39.232
5	11	1	39.232
6	6	6	39.232
6	10	5	39.159
7	1	5	39.232
7	7	7	39.232
7	13	5	39.232
7	14	4	39.187
8	8	8	39.232
9	4	8	39.159
9	9	9	39.232
9	10	9	39.321
9	14	8	39.197
10	9	10	39.315
10	10	10	39.232
10	11	10	39.304
11	10	11	39.3
11	11	11	39.232
11	12	11	39.232
12	11	12	39.289
12	12	12	39.232
12	13	12	39.289
13	7	12	39.195
13	12	13	39.28
13	13	13	39.232
13	14	13	39.275

α 、 β 、 γ 角度が 90 度の場合は成り立つが、90 度から異なる場合、逆格子で扱わないと合わなくなる
実格子、逆格子の切り替え

hklAngle 1.005GS by CTR user:HelperTex CTR

File Real Help

material

hklAngle 1.005GS by CTR user:HelperTex CTR

File Reciprocal lattice Help

hklAngle 1.005GS by CTR user:HelperTex CTR

File Reciprocal lattice Help

material: A-Iron.TXT

Name: A-Iron

Crystal structure: Cubic

Real lattice:

Reciprocal lattice:

h1k1l:

h2k2l:

hkl:

Angle:

+del:

MinIndex:

MaxIndex:

4. 例えば、PETの場合

hklAngle 1.005GS by CTR user:HelperTex CTR

File Reciprocal lattice Help

material

PET.TXT

Name PET

Crystal structure Triclinic

Real lattice 4.537 5.922 10.771 99.92 118.62 111.37

Get real lattice Edit Material Data

Reciprocal lattice

Get real lattice 0.293 0.2 0.117 64.896 53.8 58.879

h1k1l 1 0 0

h2k2l 0 0 1

Reciprocal Calc Angle 118.62

逆格子で $\{1,0,0\}$ と $\{0,0,1\}$ の角度を計算すると、実格子の β 角度が得られ、
実格子で計算すると逆格子の β 角度が得られる。

hklAngle 1.005GS by CTR user:HelperTex CTR

File Real lattice Help

material

PET.TXT

Name PET

Crystal structure Triclinic

Real lattice 4.537 5.922 10.771 99.92 118.62 111.37

Get real lattice Edit Material Data

Reciprocal lattice

Get real lattice 0.293 0.2 0.117 64.896 53.8 58.879

h1k1l 1 0 0

h2k2l 0 0 1

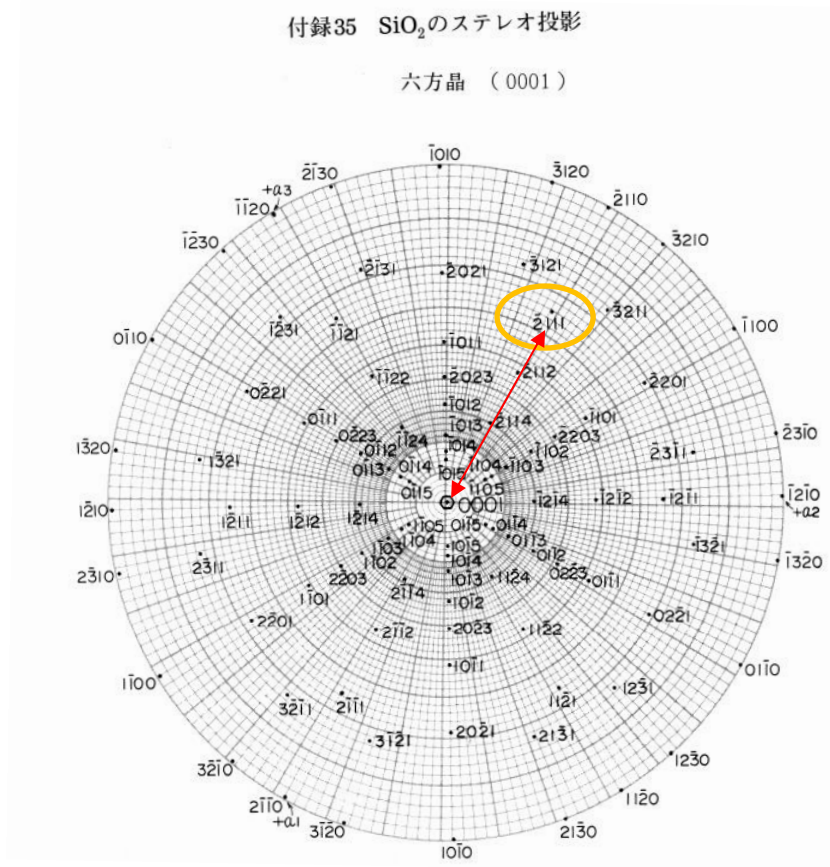
Real Calc Angle 53.8

5. 高分子材料評価をWilchinsky法で解析する場合{0,-1,1}と{0,1,0}面の角度計算は

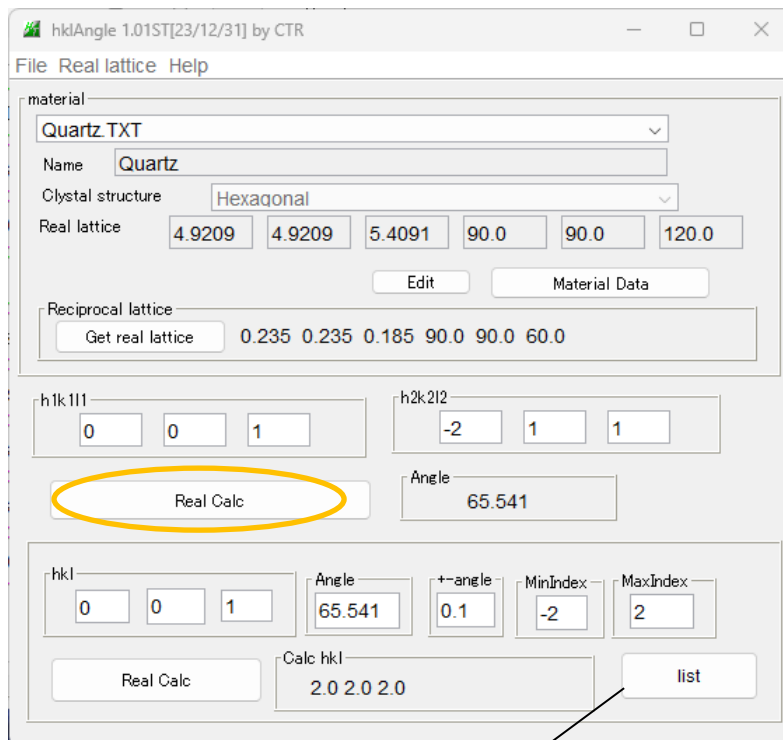
The screenshot shows the 'hklAngle 1.005GS by CTR' software window. The interface includes a menu bar (File, Reciprocal lattice, Help) and several input fields and buttons. The 'material' section is set to 'PET.TXT' with 'Name' 'PET' and 'Crystal structure' 'Triclinic'. The 'Real lattice' parameters are 4.537, 5.922, 10.771, 99.92, 118.62, and 111.37. The 'Reciprocal lattice' section shows a 'Get real lattice' button and the values 0.293, 0.2, 0.117, 64.896, 53.8, and 58.879. Below this, two sets of hkl indices are shown: 'h1k1l' with values 0, -1, 1 and 'h2k2l' with values 0, 1, 0. A 'Reciprocal Calc' button is highlighted, and the resulting 'Angle' is 126.243. At the bottom, another 'Reciprocal Calc' button is shown with 'hkl' values 0, 0, 0, 'Angle' 90, '+-del' 0.1, 'MinIndex' 0, and 'MaxIndex' 15. A 'list' button is also present.

で計算出来る。

6. 極点図

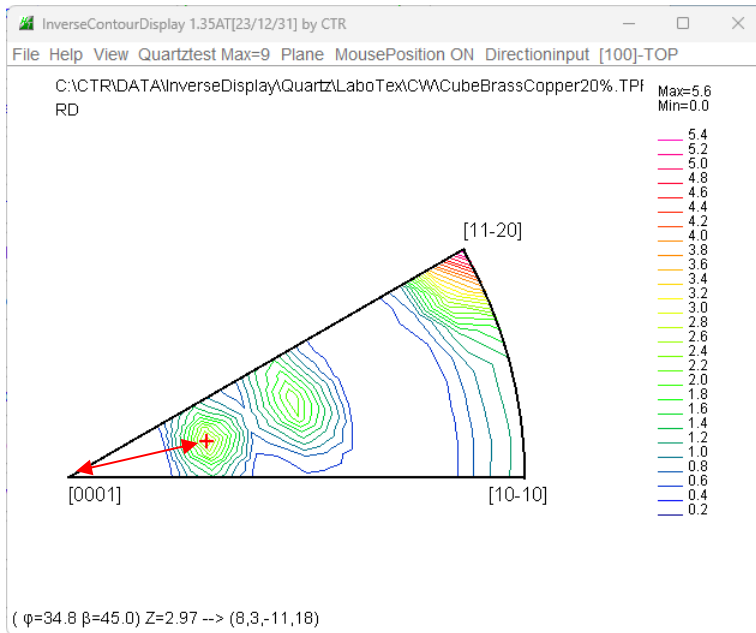


$\{0001\} - \{-21-11\}$ 角度は



-2	-2	2	65.54052
-2	1	1	65.54052
-1	-1	1	65.54052
-1	2	1	65.54052
1	-2	1	65.54052
1	1	1	65.54052
2	-1	1	65.54052
2	2	2	65.54052

7. 逆極点图



InverseDirection 1.19T[23/12/31] by CTR

File Help

Max index 15
Method Plane
Material Quartztest.txt
φ 34.8 β 45 Calc Center[001]
Hexagonal: Input βangle 30->60 3Axis [11-20] B
34.8 45.0 --> (8 3 18) --> (8 3 -11 18)
Plane
h 8 k 3 l 18 Calc
h 8 k 3 t -11 l 18 Calc
Direction
Max index 15 34.8 45.0 --> [11 8 15]
34.8 45.0 --> [14 5 -19 45]
Exit return Structure

hklAngle 1.01ST[23/12/31] by CTR

File Real lattice Help

material
Quartz.TXT
Name Quartz
Crystal structure Hexagonal
Real lattice 4.9209 4.9209 5.4091 90.0 90.0 120.0
Edit Material Data
Reciprocal lattice
Get real lattice 0.235 0.235 0.185 90.0 90.0 60.0
hkl111 0 0 1
h2k2l2 8 3 18
Angle 34.779
Real Calc
hkl 0 0 1
Angle 67.439 +-angle 0.1 MinIndex -2 MaxIndex 2
Real Calc Calc hkl 2.0 -1.0 1.0 list

以下は

HCP 金属のシュミット因子計算

機能・構造材料工学 岡安和人

より

<例3>

純マグネシウムの初方位 $(\alpha, \beta)=(18, 15)$ としたときの $(11\bar{2}2)[\bar{1}1\bar{2}3]$ すべり系におけるシュミット因子を計算する。

まず $(11\bar{2}2)$ 面を fcc 上の指数で表すために $(0001)-(11\bar{2}2)$ の面間角度を計算する。(7)より

$$\cos \phi_2 = \frac{\frac{3}{4} \times \frac{1}{1.62^2} \times 1 \times 2}{\sqrt{\left(\frac{3}{4} \times \frac{1}{1.62^2} \times 1^2\right) \left(1^2 + 1^2 + 1 \times 1 + \frac{3}{4} \times 2^2 \times \frac{1}{1.62^2}\right)}} = \frac{0.572}{\sqrt{0.286 \times 4.143}} = 0.525$$

$$\phi_2 \doteq 58.4^\circ$$

β は 0001 標準投影図²⁾より 30° であるので $(0001)-(11\bar{2}2)=(58.4, 30)$

$[\bar{1}1\bar{2}3]$ 方向と (0001) との角度は $(0001)=[0001]$ であるので、 $[0001]-[\bar{1}1\bar{2}3]$ の軸間角度を計算する。(8)より

$$\cos \theta_2 = \frac{(-1 \times 0) + (-1 \times 0) + \frac{1}{2}(-1 \times 0 + 0 \times -1) + \frac{1}{3} \times 3 \times 1 \times 1.62^2}{\sqrt{\left\{(-1)^2 + (-1)^2 + (-1) \times (-1) + \frac{1}{3} \times 3^2 \times (1.62)^2\right\} \left\{\frac{1}{3} \times 1^2 \times 1.62^2\right\}}} = \frac{2.624}{\sqrt{10.873 \times 0.875}}$$

$$= 0.851$$

$$\theta_2 \doteq 31.6^\circ$$

の計算を行う。

