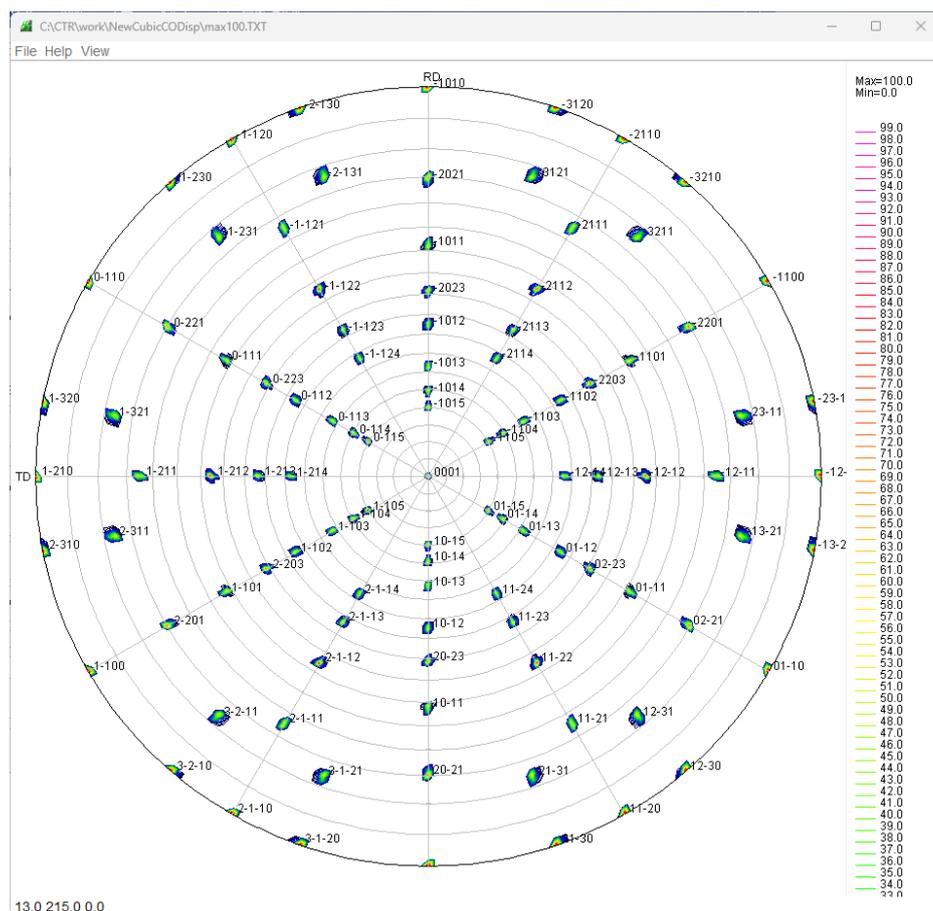


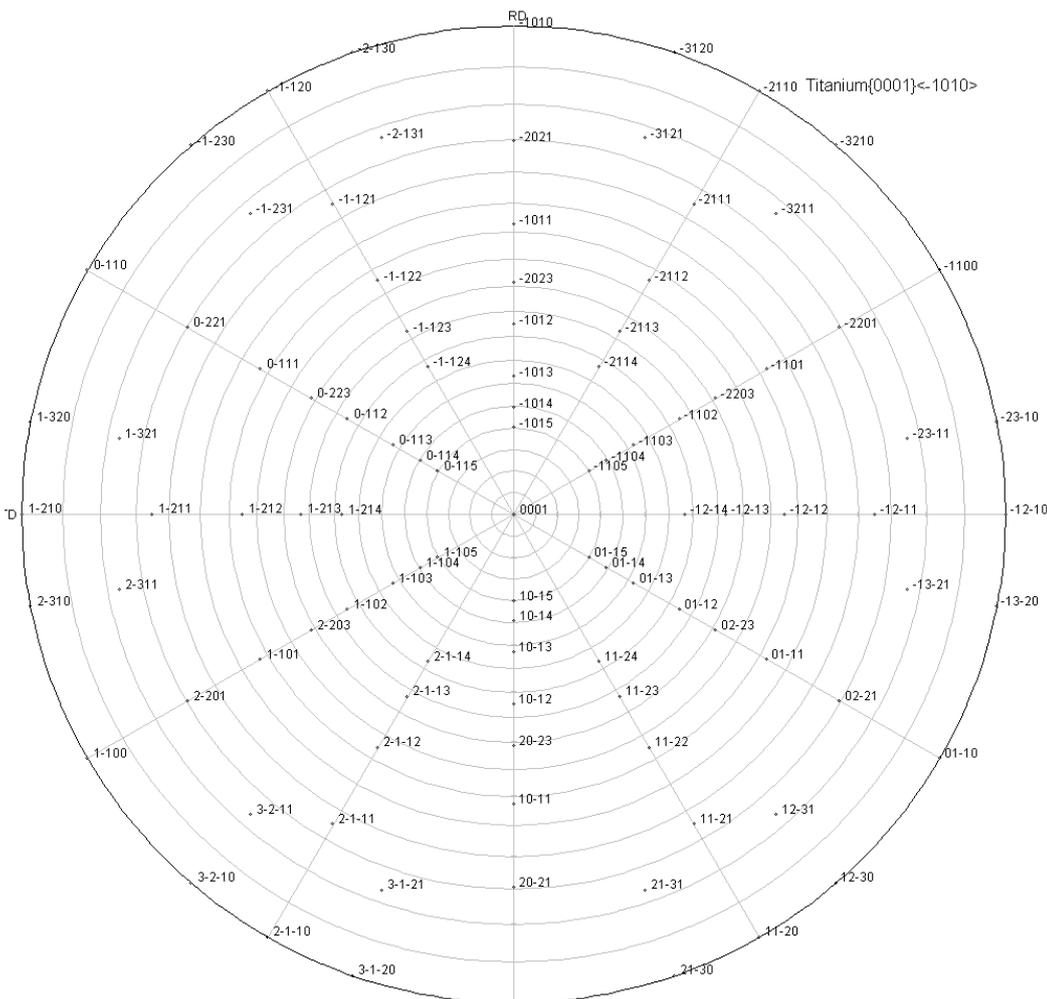
Cubic, Tetragonal, Orthorhombic, Hexagonal 対応の
ステレオ投影図描画ソフトウェア
s t e r e o G P Ver1.21

T i t a n i u m (0 0 0 1) [- 1 0 1 0] ステレオ投影図



2025年01月19日
H e p e r T e x O f f i c e

1. 概要
2. Cubic {001} <100>のステレオ投影図
3. Hexagonal Quartz {001} <100>の{111}極点図
4. ステレオ投影図描画ソフトウェア
5. stereoGPによるQuartz {0001} <-1010>ステレオ投影図
6. Hexagonal
 - 6.1 Titanium Basal (0001) [10-10] と (0001) [2-1-10] 比較
 - 6.2 Titanium T (-12-10) [10-10] と (01-10) [2-1-10] 比較
 - 6.3 Titanium R (-12-10) [0001] と (01-10) [0001] 比較
 - 6.4 TitaniumのTD-split
 - 6.5 TitaniumのRD-split
 - 6.6 補足
7. 一般的な極点図描画 Titanium Transverse (01-10) [2-1-10]
 - 7.1 極点図のステップ間隔変更
8. Tetragonal
9. Orthorhombic
10. 等高線をドットにし描画の高速化
11. Cubic
 - 11.1 Cubic {001} <100>



ステレオ投影図高速化による描画（瞬時に描画可能）

1. 概要

ステレオ投影図は、複数の極点図を重ね合わせた極点図で単純は方位であれば、複数の極点図からステレオ投影図を参考にすれば方位の決定が可能になります。

リガク [X線回折ハンドブック] に Cubic のステレオ投影図が収録されている。

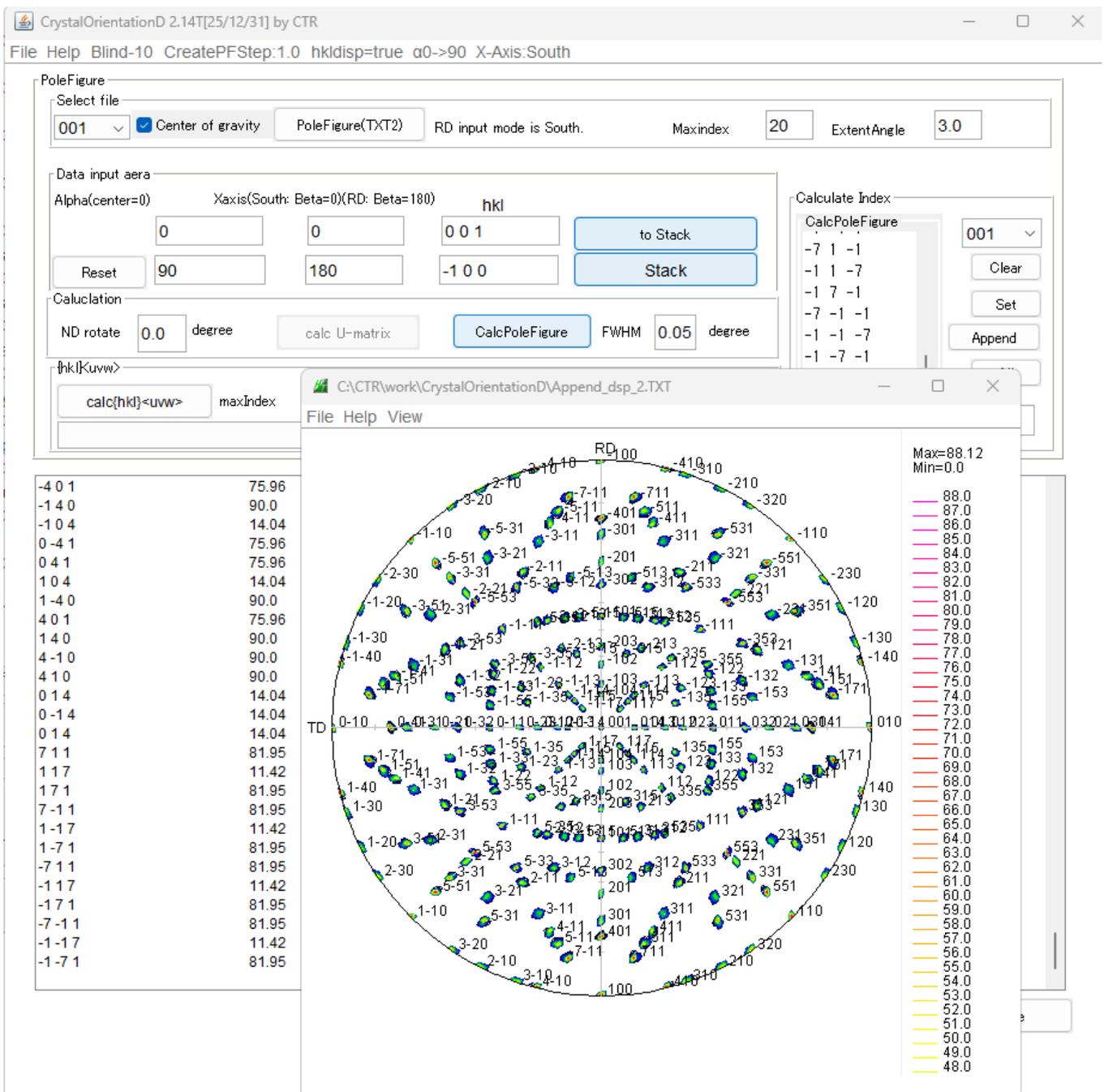
CTRソフトウェアは、Cubic のステレオ投影図を CrystalOrientationD ソフトウェアで計算表示を行っている。

Hexagonal に対し HexaConvert ソフトウェア、単一極点図の計算表示が可能であるが複数の極点図を重ねる機能はありません。

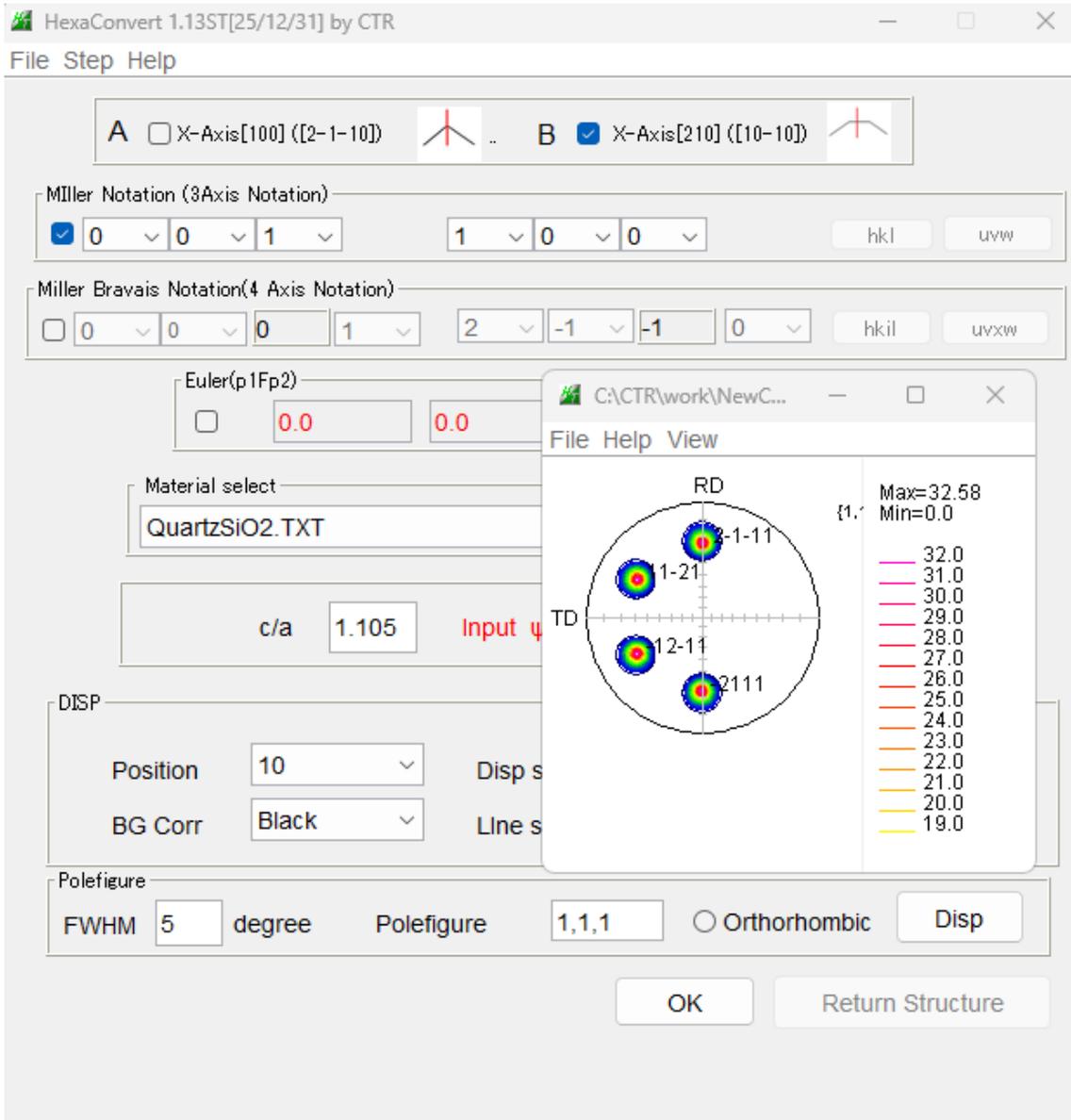
Hexagonal, Tetragonal, Orthorhombic の複数の極点図を重ね合わせるソフトウェアとして stereoGP ソフトウェアの試作を行ってみました。

Ver 1.21 で Cubic の追加により全ての方位のステレオ投影図描画が可能になりました。

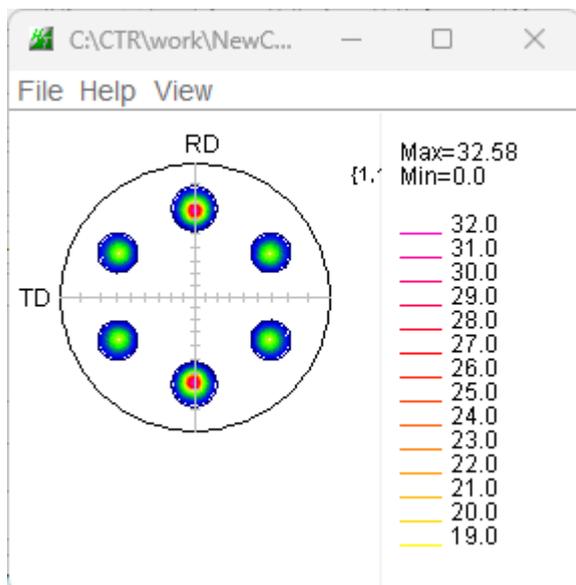
2. Cubic {001} <100> のステレオ投影図



3. Hexagonal Quartz {001} <100>の{111} 極点図

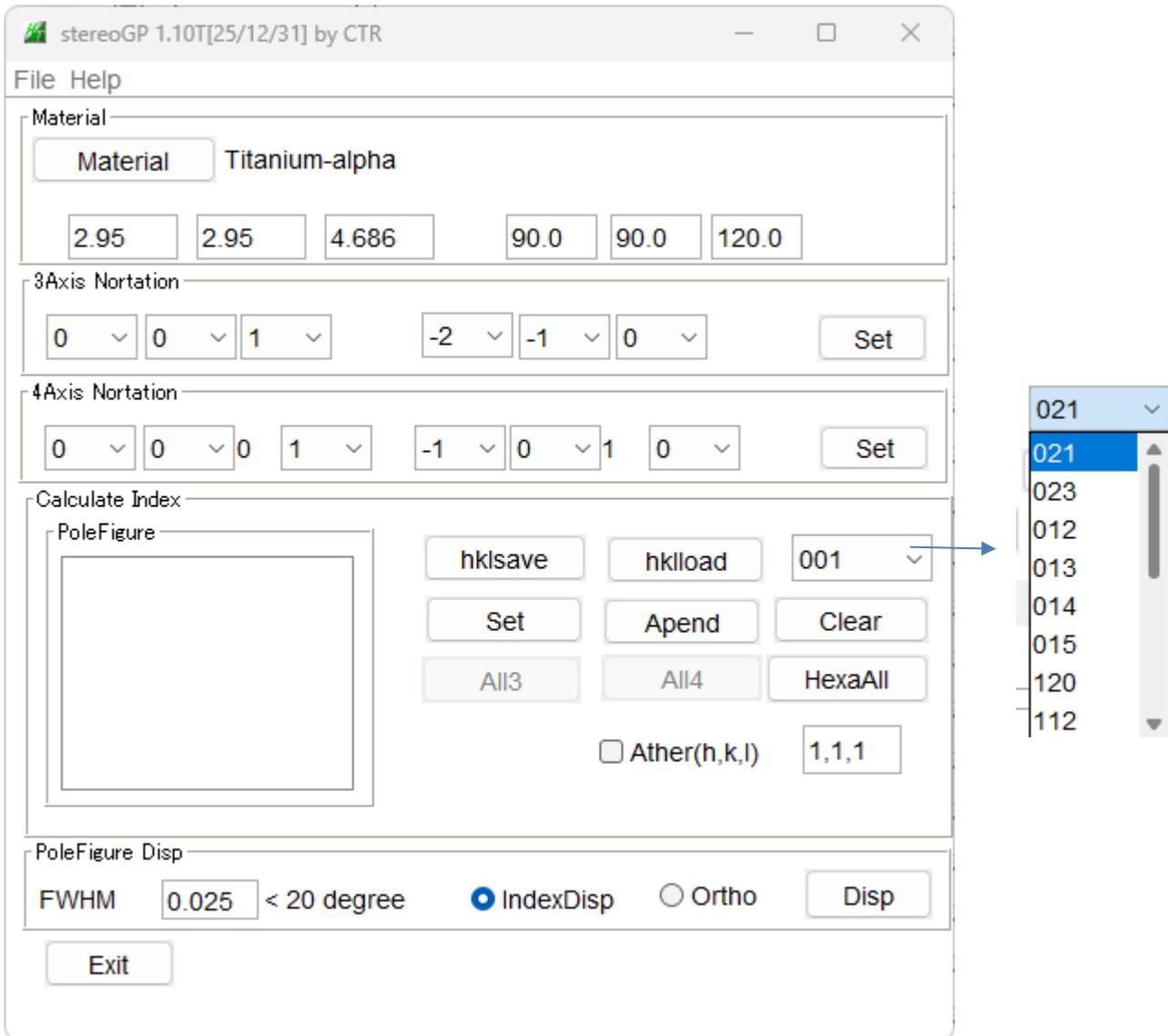


Triclinic → Orthorhombic



4. ステレオ投影図描画ソフトウェア

Hexagonal, Tetragonal, Orthorhombicに対応



h k l s a v e : 指数群の s a v e

h k l l o a d : s a v e された指数群 n o l o a d

S e t : 選択指数、あるいは A t h e r の入力

A p p e n d : 選択された指数群に入力指数を追加

A l l 3 : 標準で組み込まれた指数群最大指数 3

A l l 4 : 標準で組み込まれた指数群最大指数 4

H e x a A l l : H e x a g o n a l 用に標準で組み込まれた指数群

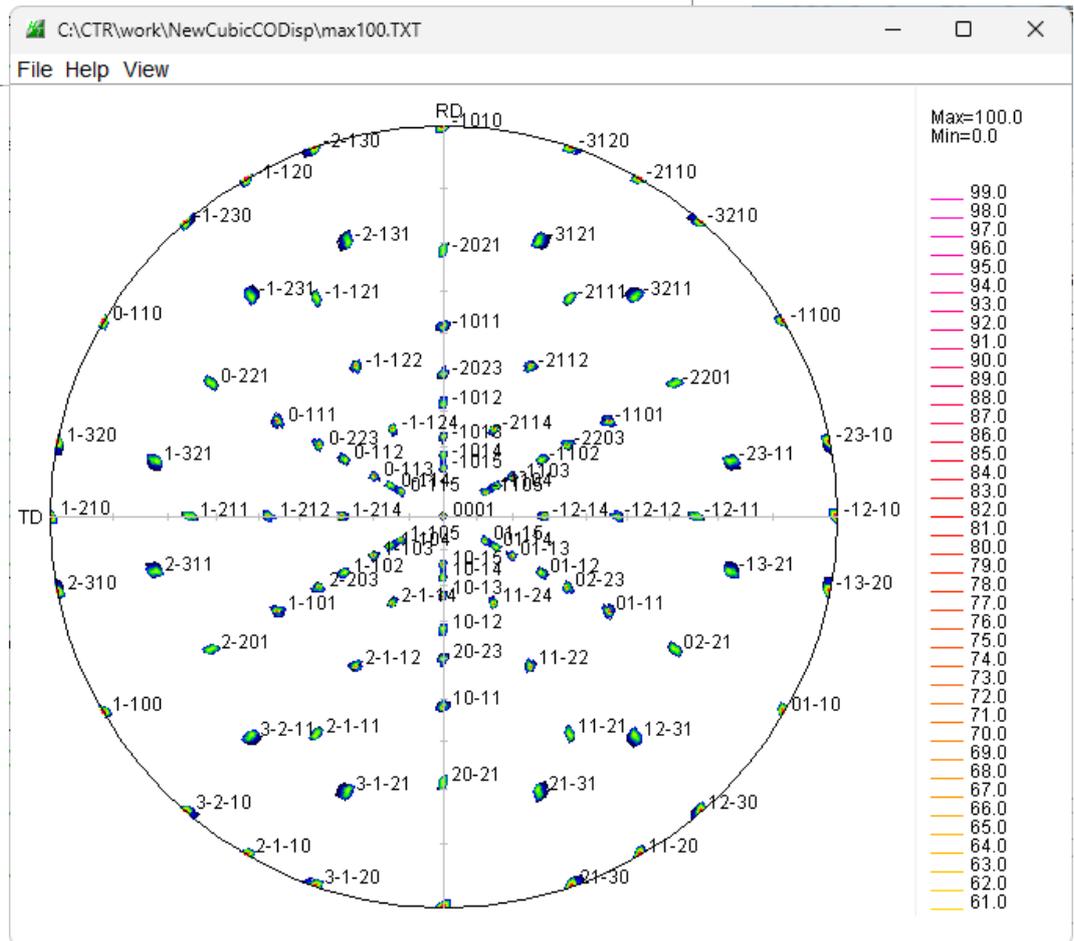
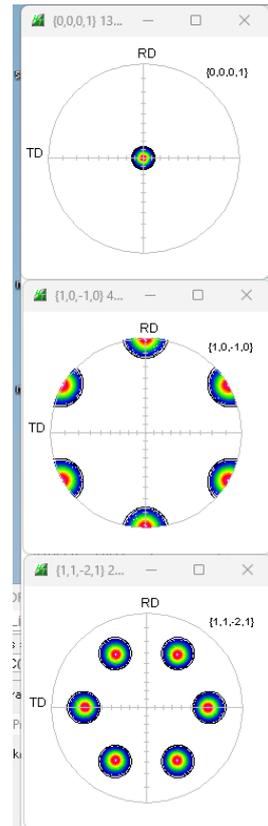
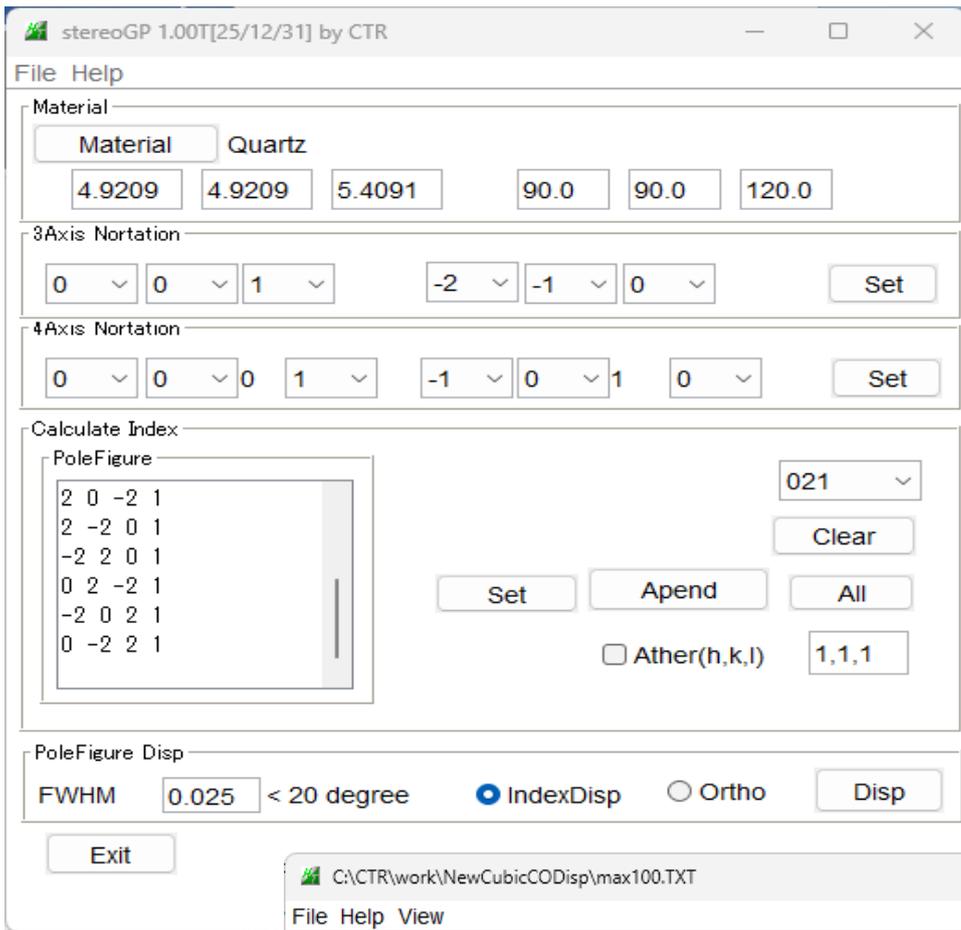
F W H M : ステレオ投影図描画方位の半価幅 (ステレオ投影図描画時は出来るだけ狭く設定)

D i s p : ステレオ投影図の描画、描画計算中は他の機能は中止されています

計算中のデータは C : ¥ C T R ¥ w o r k ¥ N e w C u b i c C O D i s p ホルダに作成される。

データは材料検索時に削除されます。

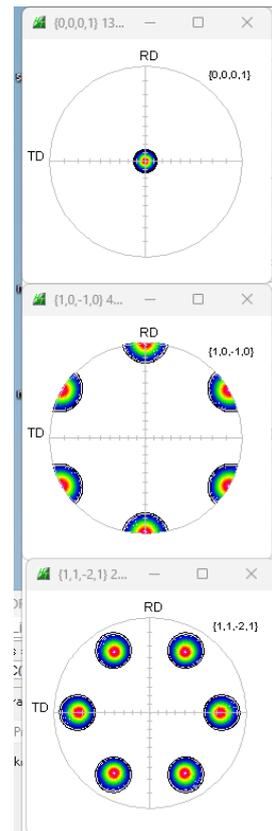
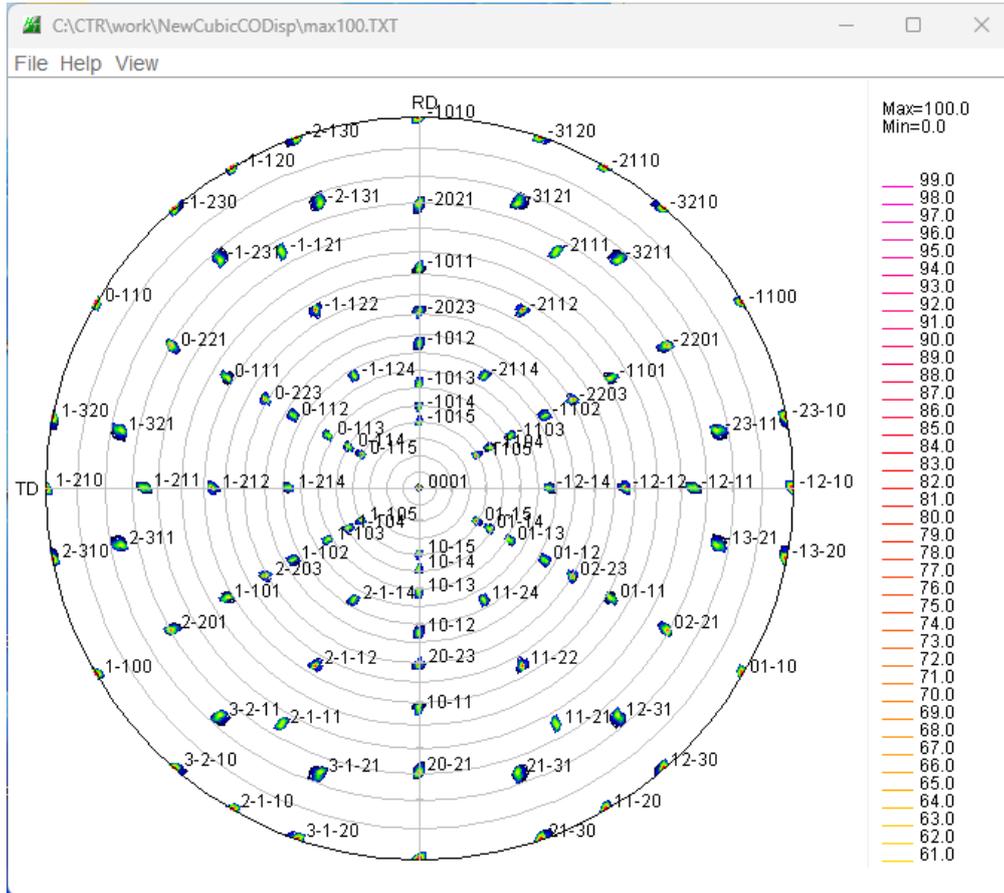
5. stereoGPによるQuartz $\{0001\} \langle -1010 \rangle$ ステレオ投影図
 リガク [X線回折ハンドブック] 付録35 SiO₂のステレオ投影の同じ表示
 ステレオ投影図は Tricking 極点図は Orthorhombic で表示



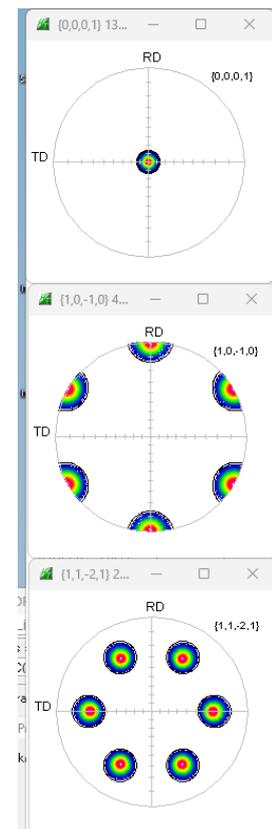
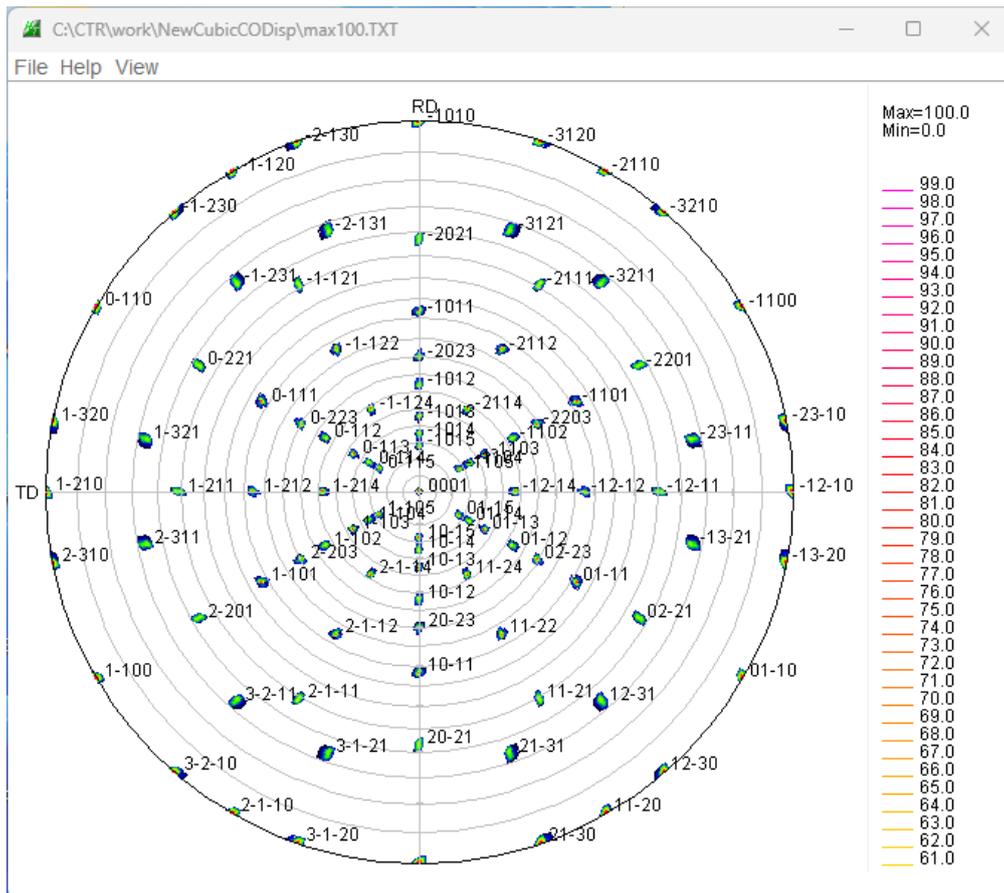
付録35の投影図の回転 +0.2は理解できない。

6. Hexagonal

同一方位をTitaniumで計算する $c/a = 1.5885$



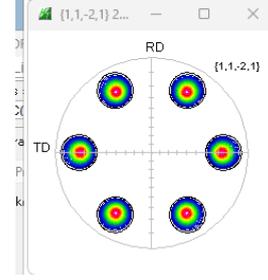
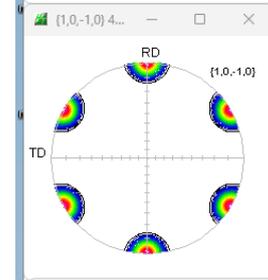
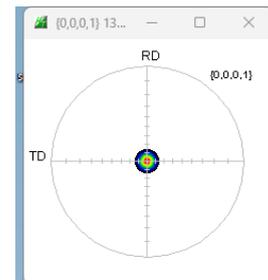
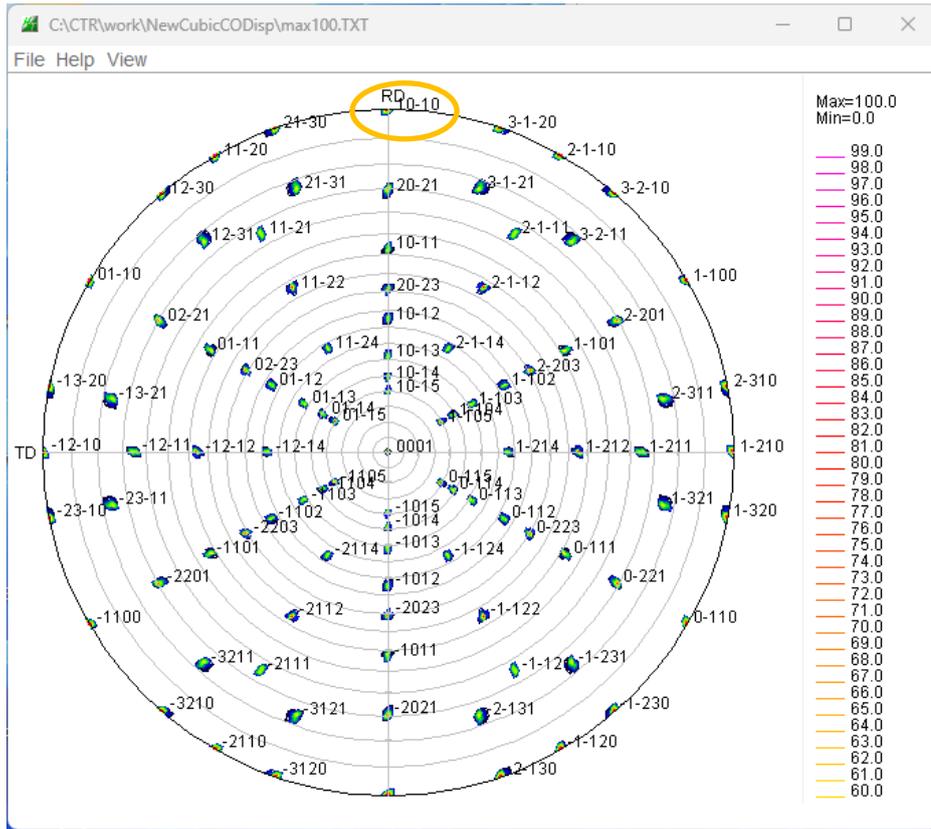
SiO₂ $c/a = 1.105$



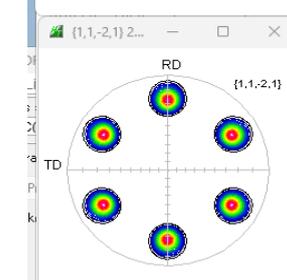
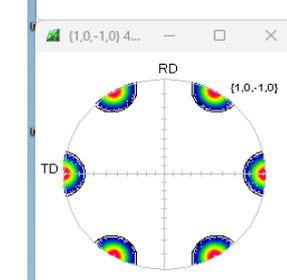
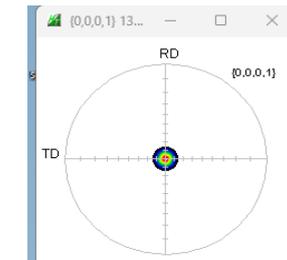
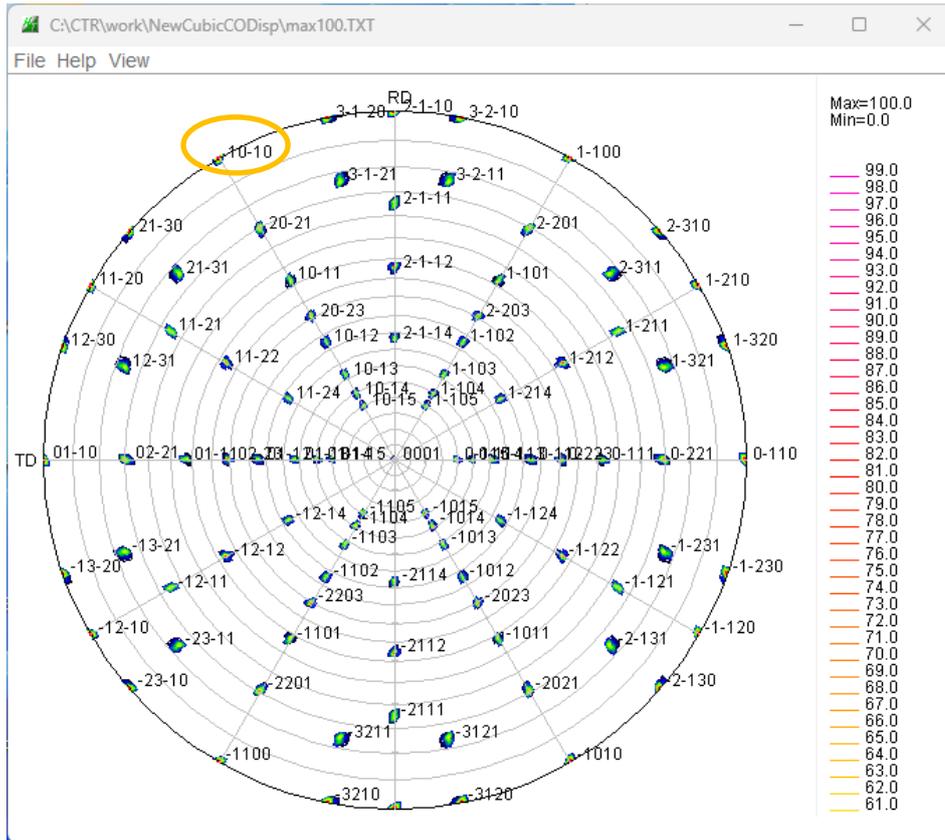
6. 1 Titanium Basal (0001) [10-10] と (0001) [2-1-10] 比較

4Axis Norotation

0 0 0 1 1 0 -1 0

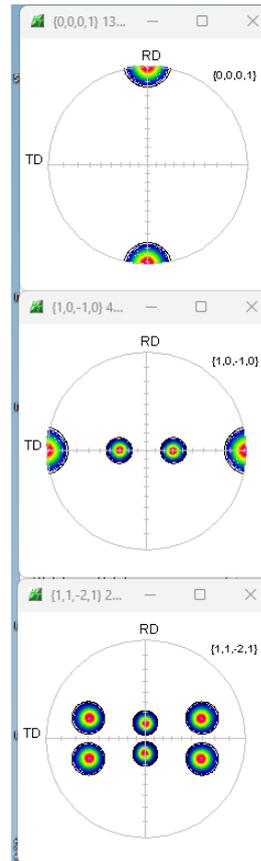
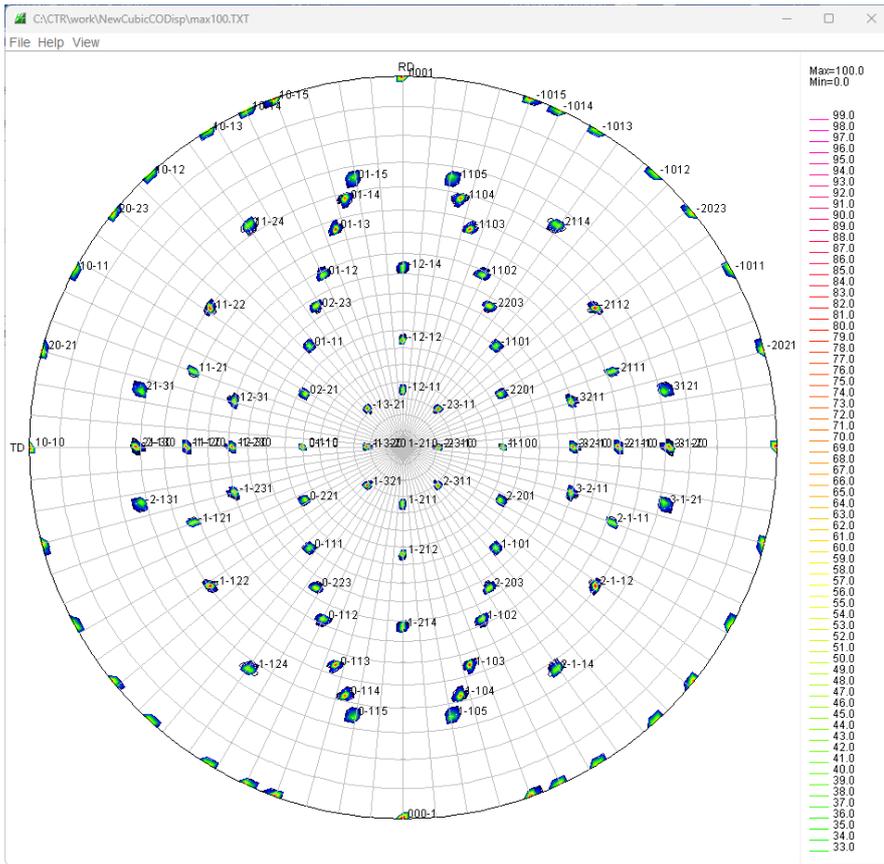


0 0 0 1 2 -1 -1 0

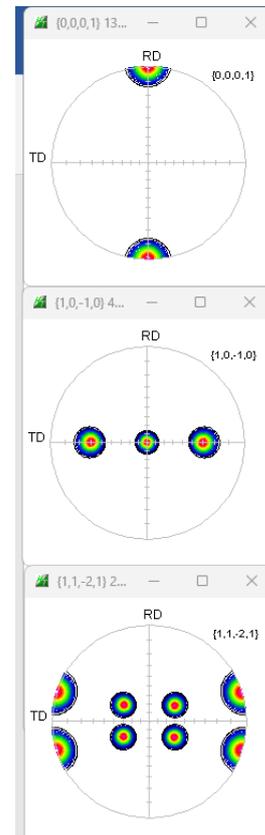
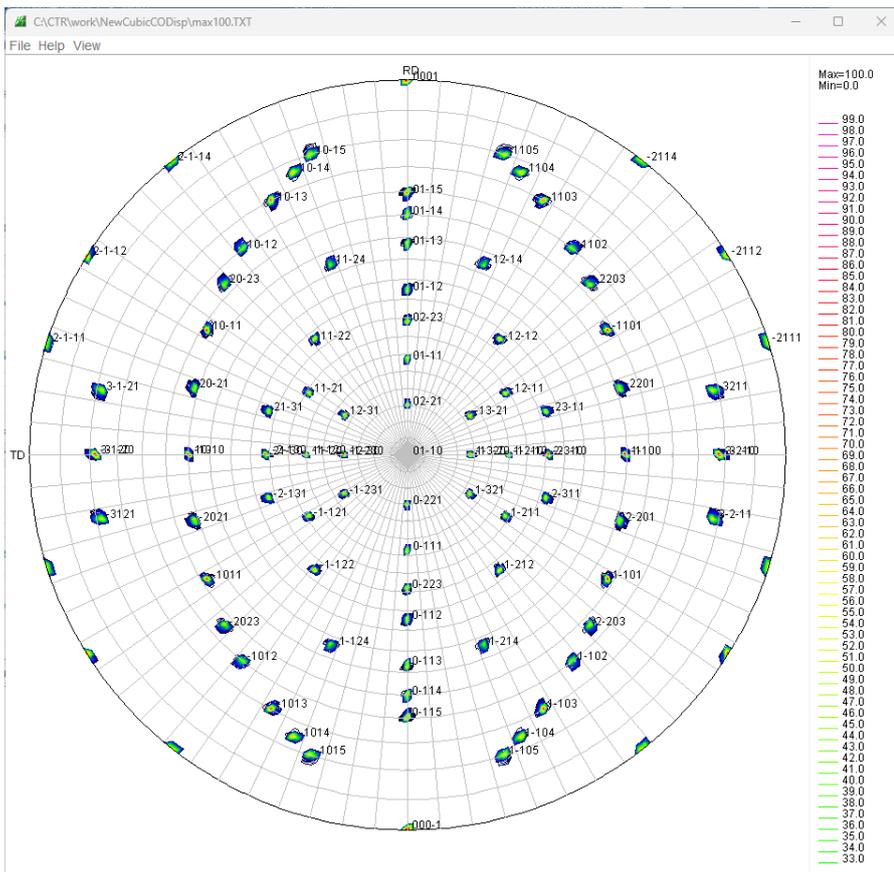


6.3 Titanium R $(-12-10)[0001]$ と $(01-10)[0001]$ 比較

-1 2 -1 0 0 0 0 1



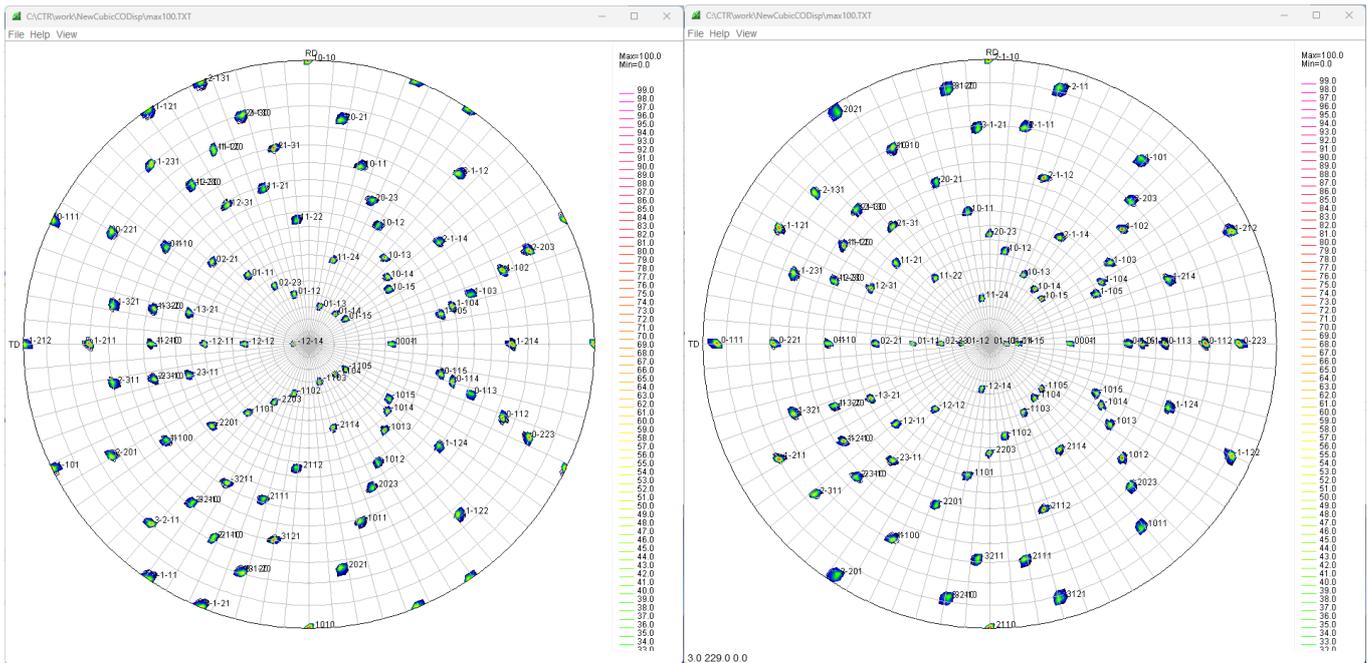
0 1 -1 0 0 0 0 1



6. 4 TitaniumのTD-split

-1 2 -1 5 1 0 -1 0

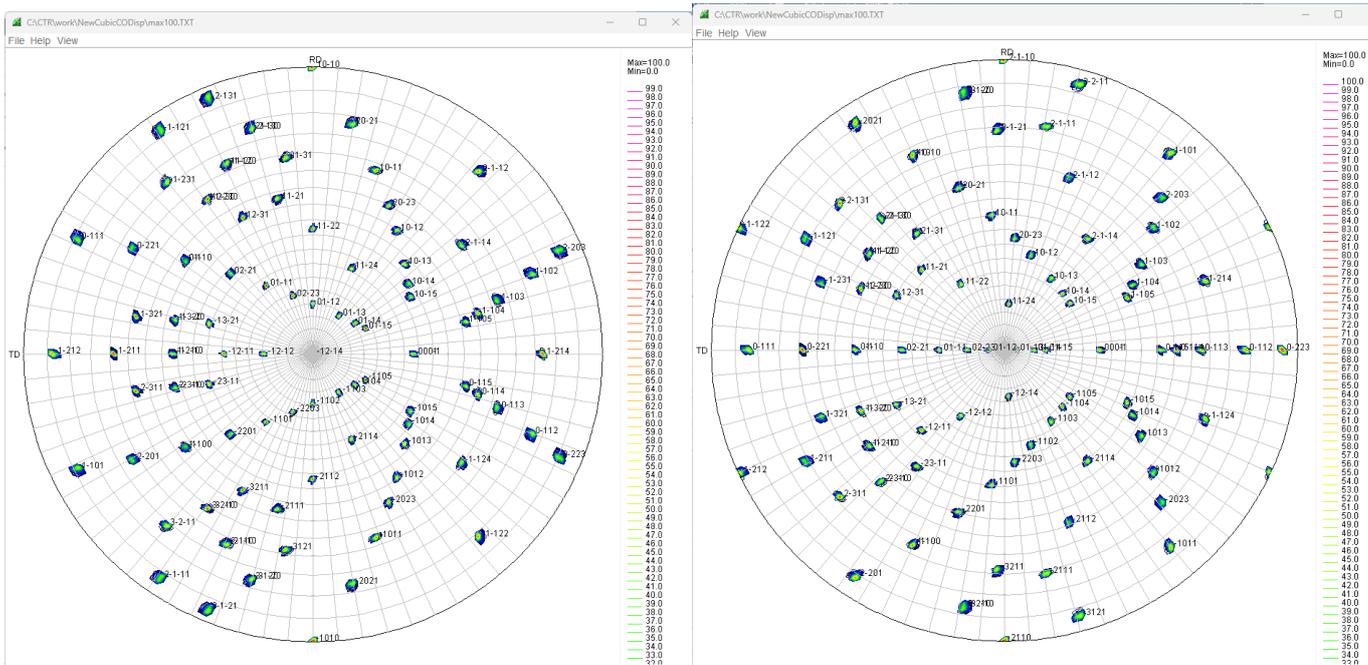
0 1 -1 3 2 -1 -1 0



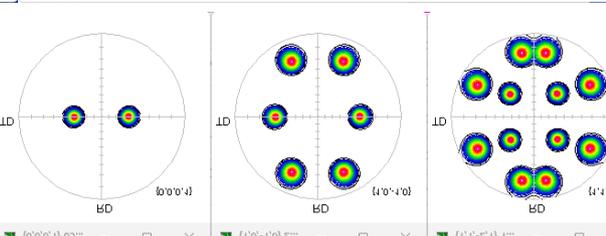
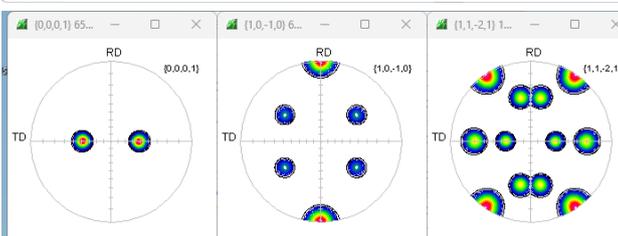
3.0 229.0 0.0

-1 2 -1 4 1 0 -1 0

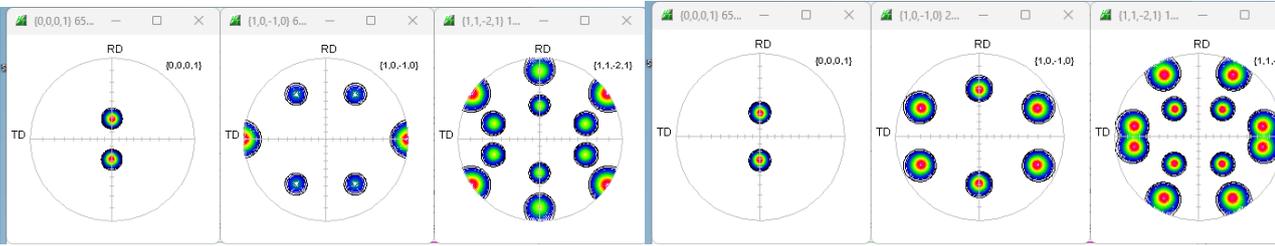
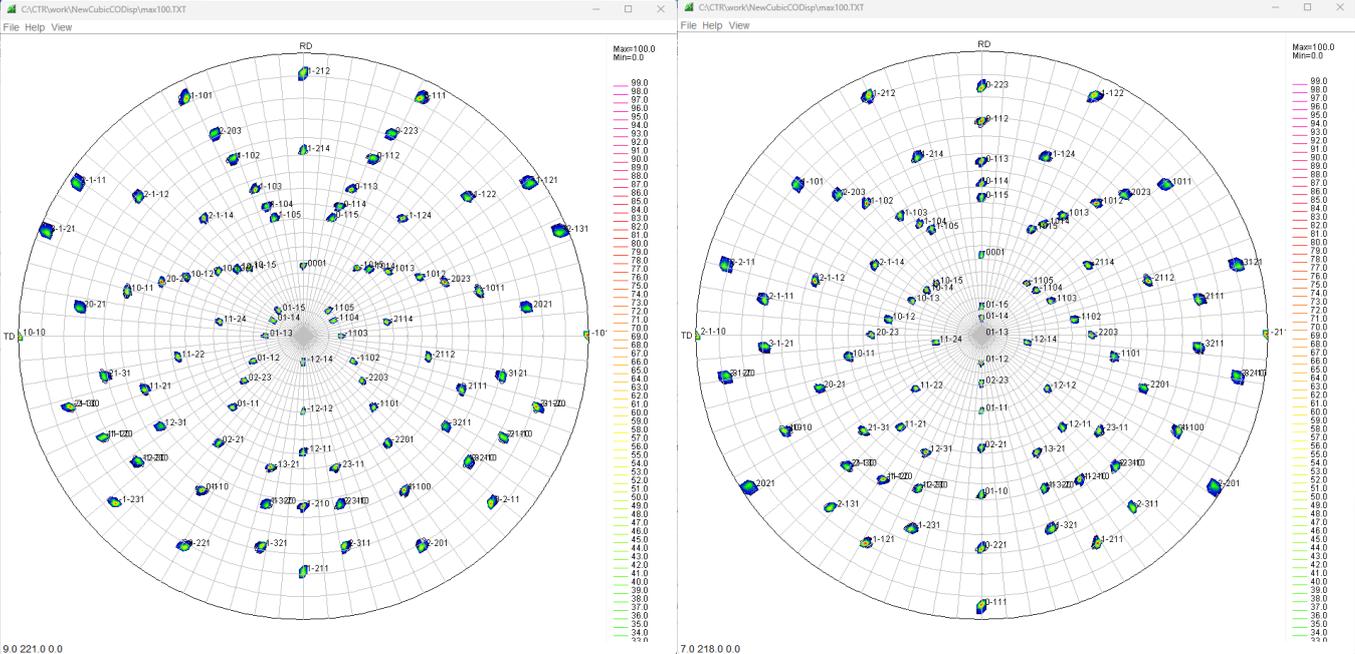
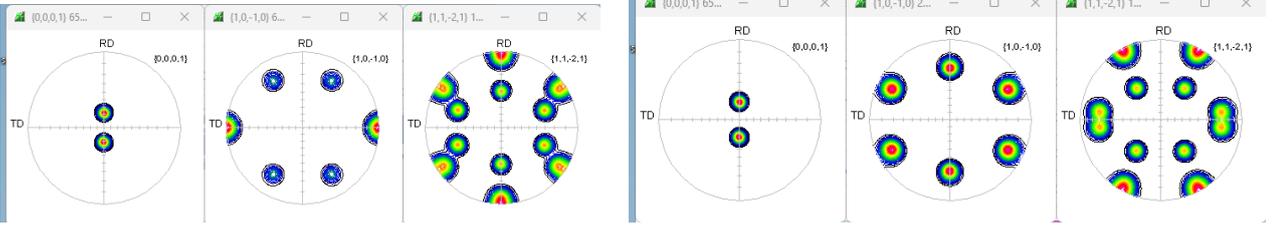
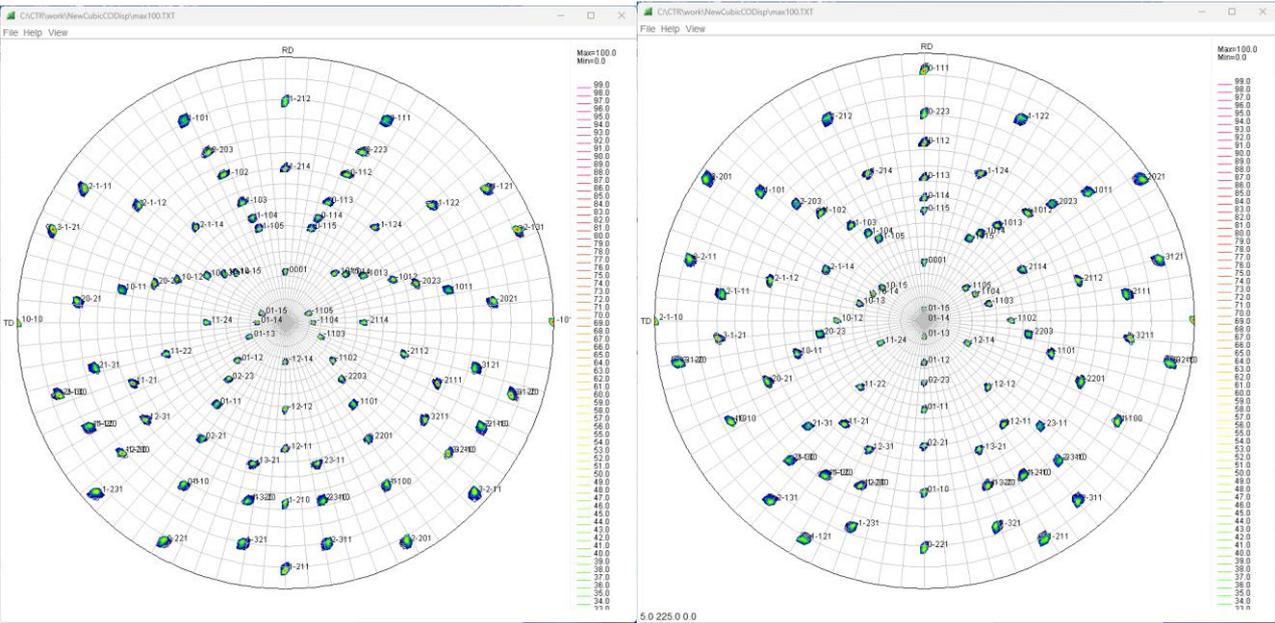
0 2 -2 5 2 -1 -1 0



14.0 14.0 0.0



6.5 TitaniumのRD-split



6. 6 補足

ステレオ投影上に指数表示を行う都合、標準指数では求める方位すべてを網羅されていない。

標準的には以下の指数が a 1 1 で計算される。

(0 2 1), (0 2 3), (0 1 2), (0 1 3), (0 1 4), (0 1 5), (1 2 0), (1 1 2), (1 1 3),
(1 1 4), (0 1 1), (1 2 1), (0 0 1), (0 1 0), (1 1 1), (1 1 0), (0 1 1)

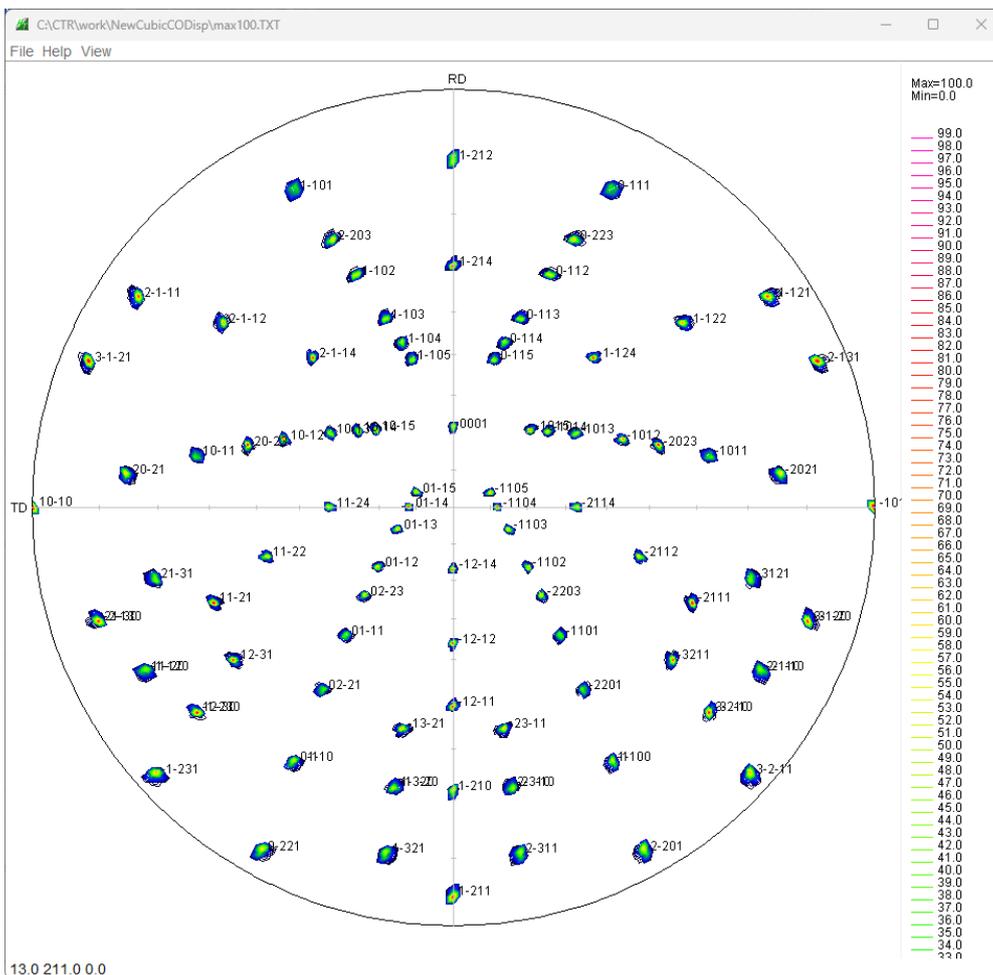
しかし、想定外の方角は ND 方向に表示がされない。

3Axis Nortation

-1 ▾ 2 ▾ 8 ▾ 0 ▾ -4 ▾ 1 ▾ Set

4Axis Nortation

-1 ▾ 2 ▾ -1 ▾ 8 ▾ 4 ▾ -8 ▾ 4 ▾ 3 ▾ Set



このような場合、単機能でND方向を探し append する。

上記の場合、以下の方法でND方向を探す。

入力

3Axis Notation

-1	2	8	0	-4	1	Set
----	---	---	---	----	---	-----

4Axis Notation

-1	2	-1	8	4	-8	4	3	Set
----	---	----	---	---	----	---	---	-----

考えられるND方向は (1 2 8) か (1 1 8) である。

(1 2 8)

PoleFigure

2	-3	1	8
1	-3	2	8
3	-2	-1	8
3	-1	-2	8
-3	2	1	8
-3	1	2	8
-2	3	-1	8

011

Clear

Set Apend All

Ather(h,k,l) 1,2,8

(1 1 8)

PoleFigure

1	1	-2	8
1	-2	1	8
2	-1	-1	8
-2	1	1	8
-1	2	-1	8
-1	-1	2	8

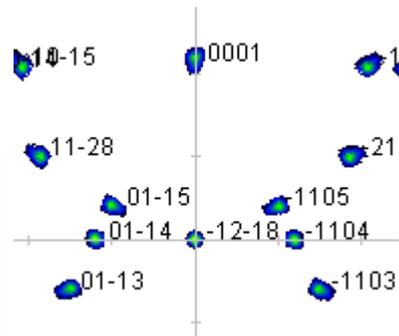
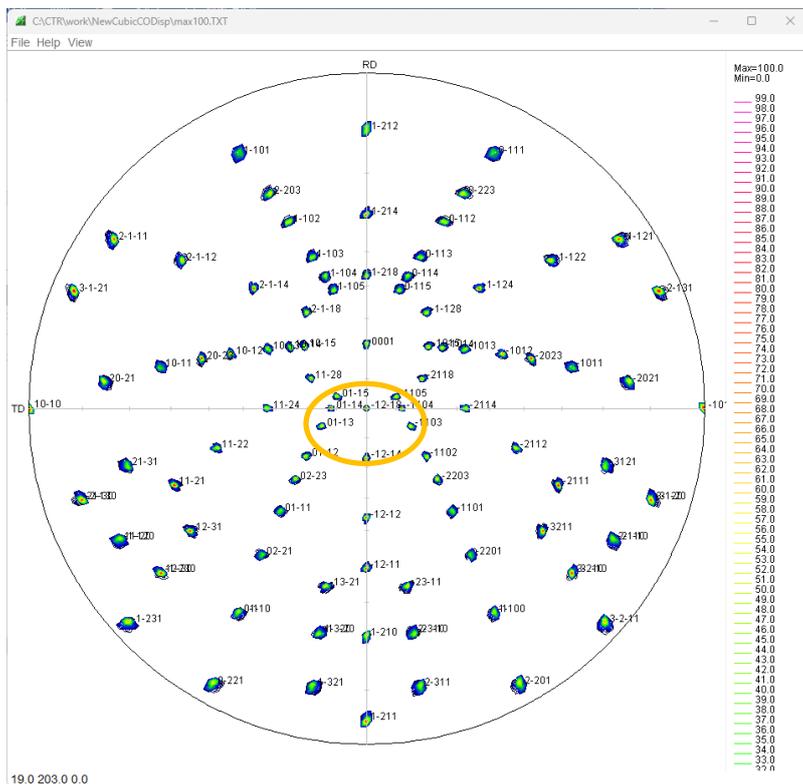
011

Clear

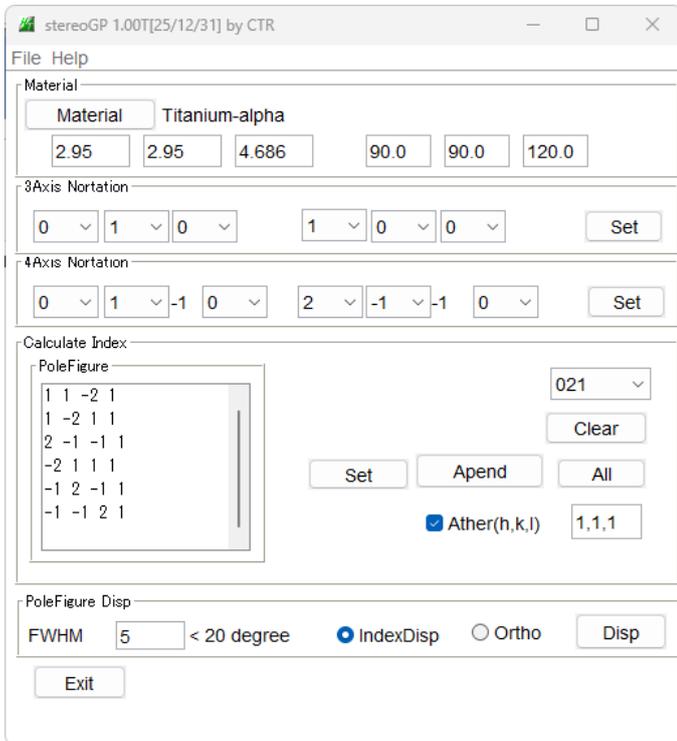
Set Apend All

Ather(h,k,l) 1,1,8

よって、All + (1 1 8) の a p p e n d でステレオ投影図を描画

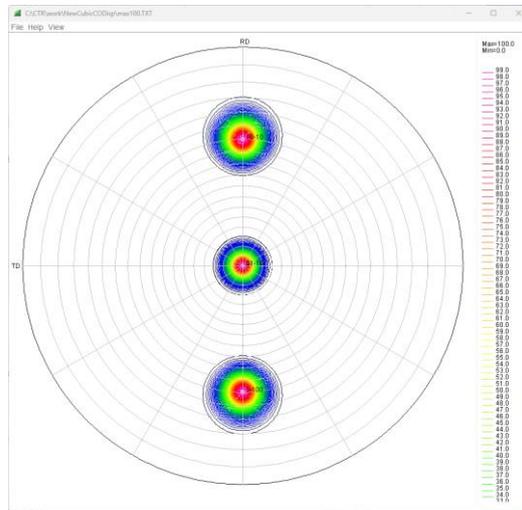
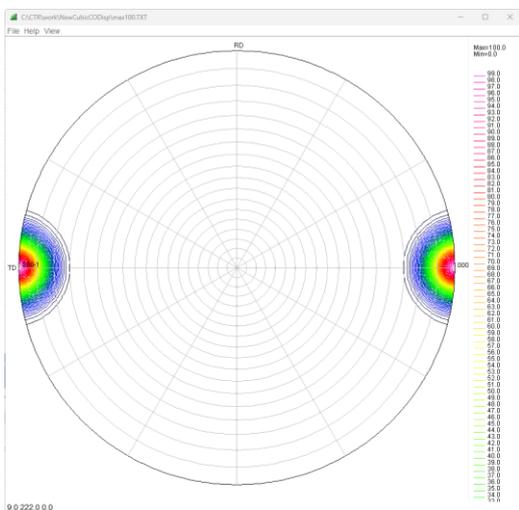


7. 一般的な極点図描画 Titanium Transverse (01-10) [2-1-10]



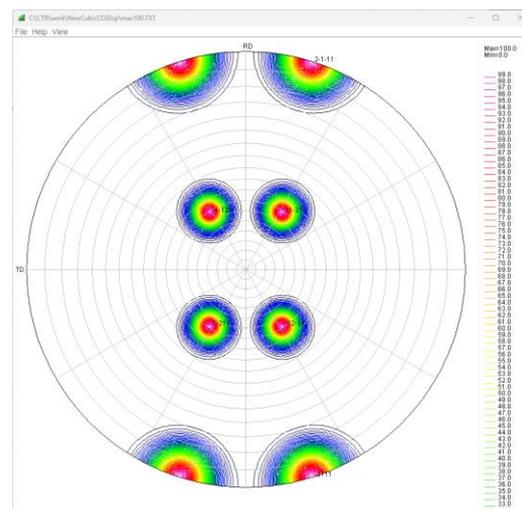
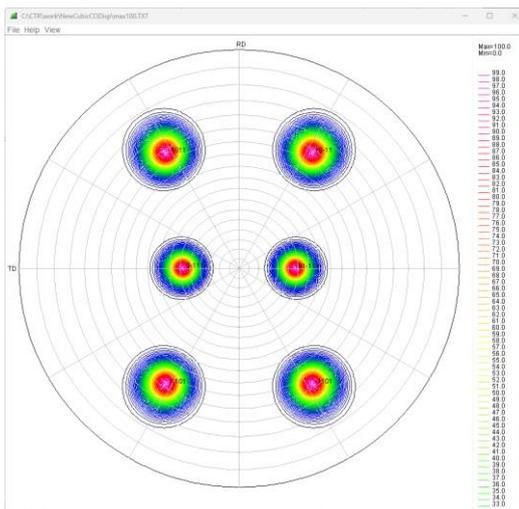
(001)

(100)と(010)は同一



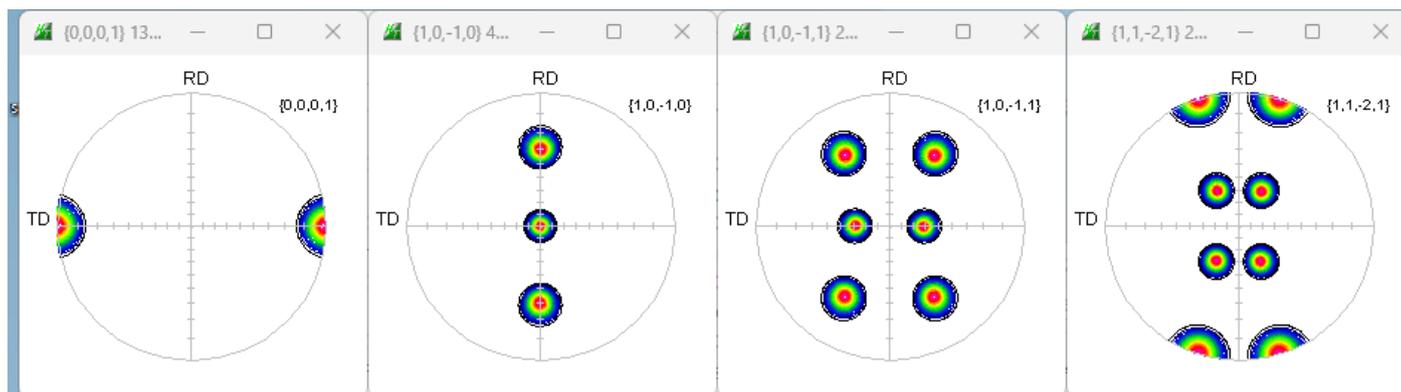
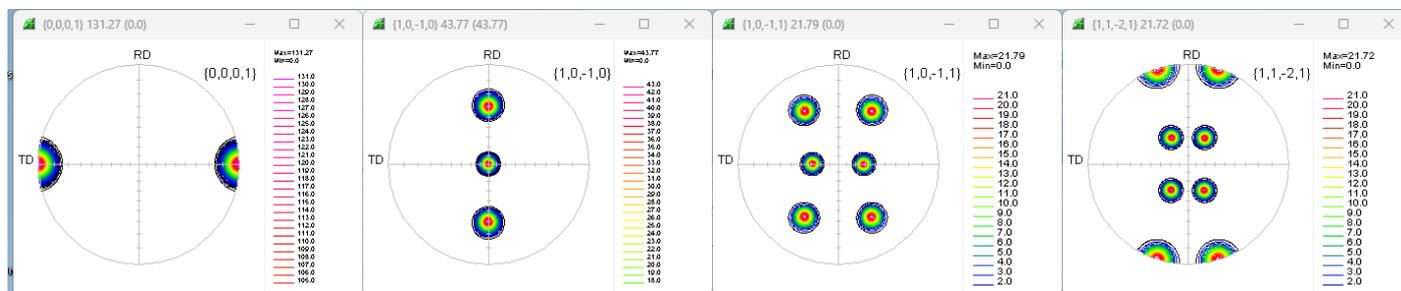
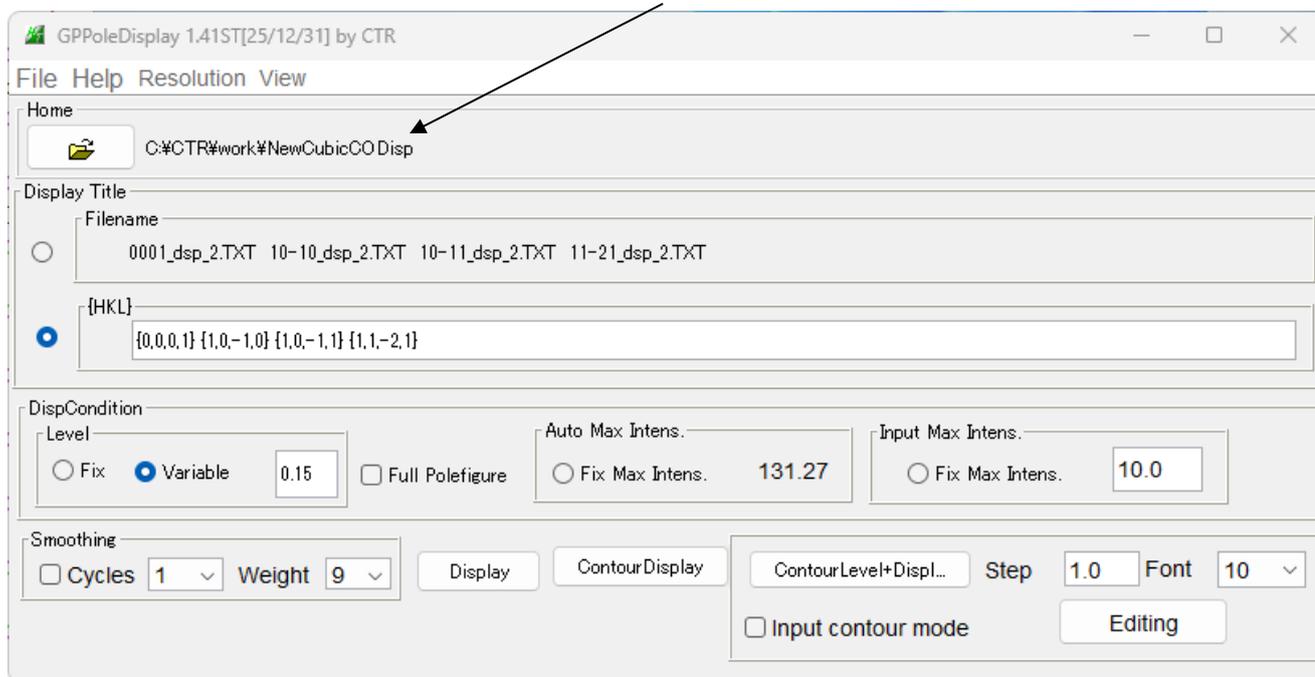
(101)と(010)は同じ

(111)

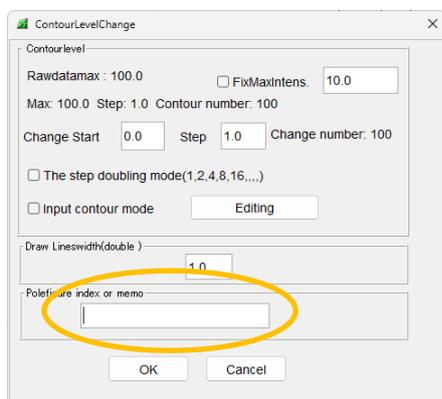


指数を指定して極点図の描画も可能、指数タイトルを表示するのであれば GPPoleDisplay で表示

計算中のデータはC:\CTR\work\NewCubicCODispホルダに作成される。

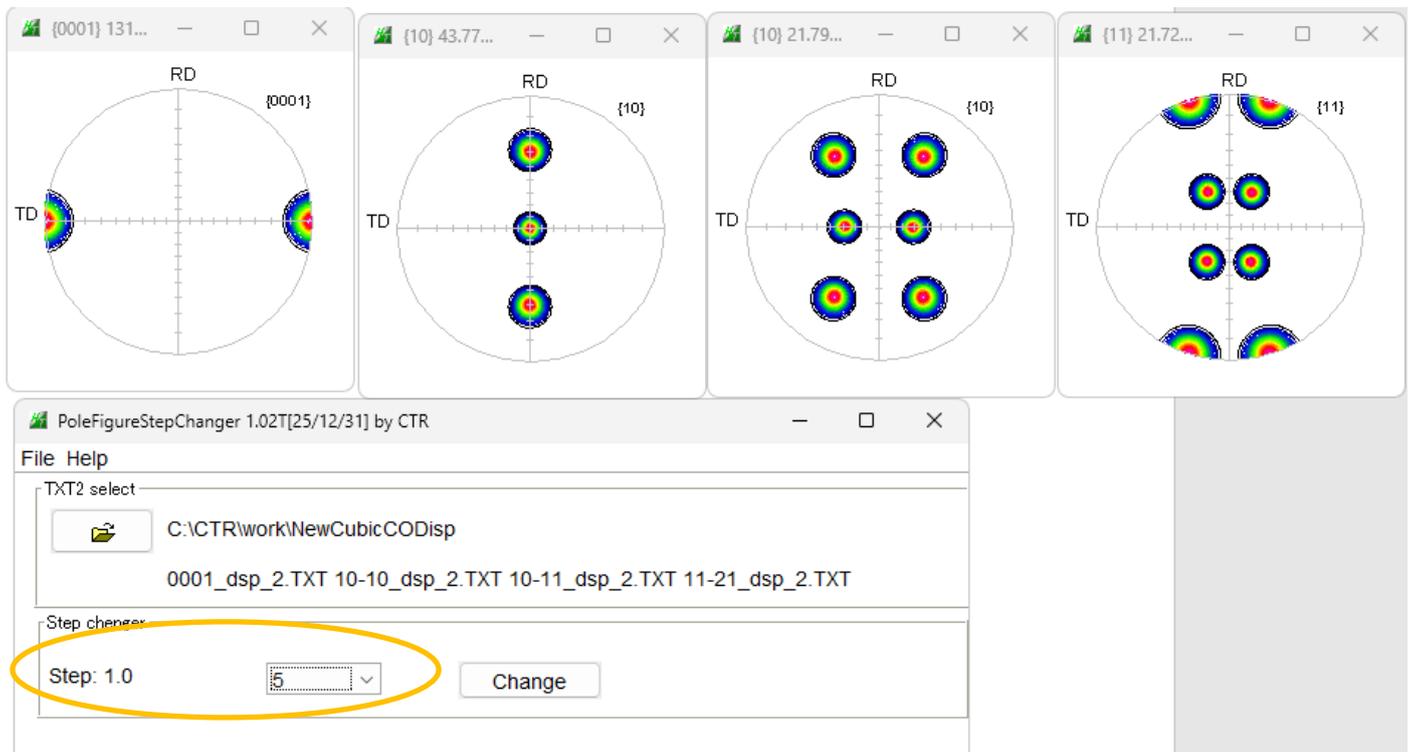


あるいは等高線変更画面で指数入力が可能

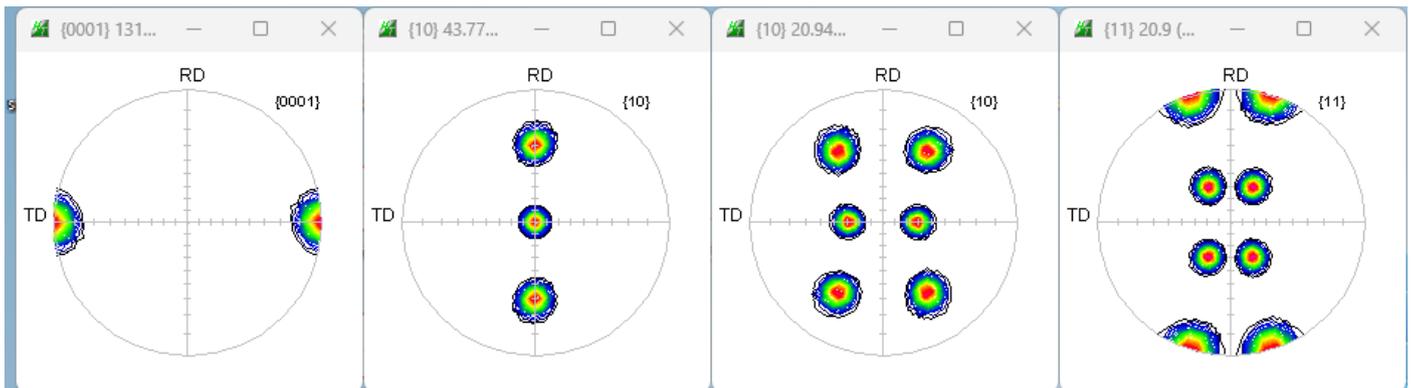


7. 1 極点図のステップ間隔変更

本ソフトウェアで生成される極点図のステップ幅は1.0度であり、一般的な5.0への変更は PoleFigureStepChanger ソフトウェアで行う
マイナス指数の指数表示がされていない(想定外)



同一ホルダに newホルダが作成され以下に生成される



(C:) > CTR > work > NewCubicCODisp > new newの検索

名前	更新日時	種類	サイズ
0001_dsp_2.TXT	2025/01/20 8:13	テキスト文書	23 KB
10-10_dsp_2.TXT	2025/01/20 8:13	テキスト文書	29 KB
10-11_dsp_2.TXT	2025/01/20 8:13	テキスト文書	29 KB
11-21_dsp_2.TXT	2025/01/20 8:13	テキスト文書	30 KB

8. Tetragonal

stereoGP 1.22T[25/12/31] by CTR

File Help

Material: **TiO2-Rutile**

4.593 4.593 2.959 90.0 90.0 90.0

3Axis Nortation: 1 1 2 -1 -1 1 Set

4Axis Nortation: 0 0 0 1 2 -1 -1 0 Set

Calculate Index

PoleFigure: All All3 All4 HexaAll

hksave hklload

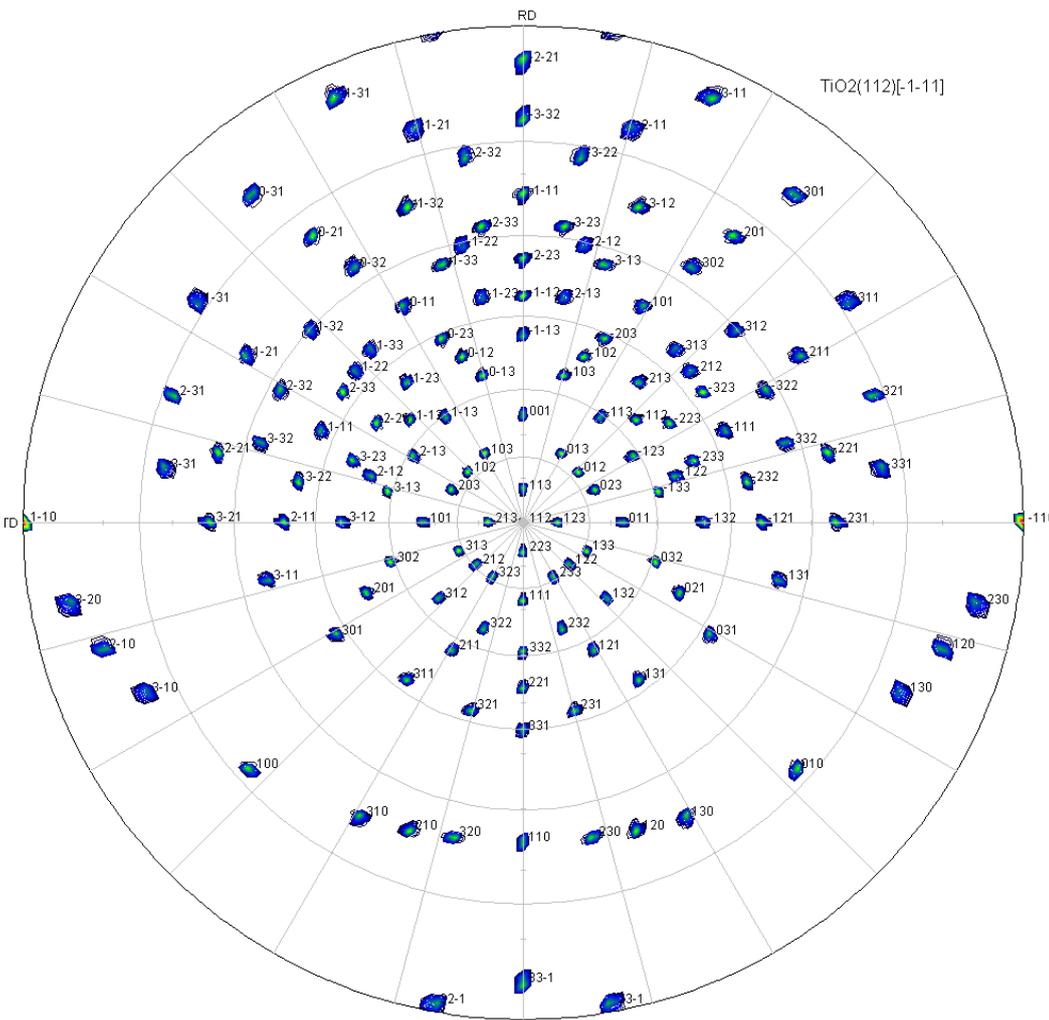
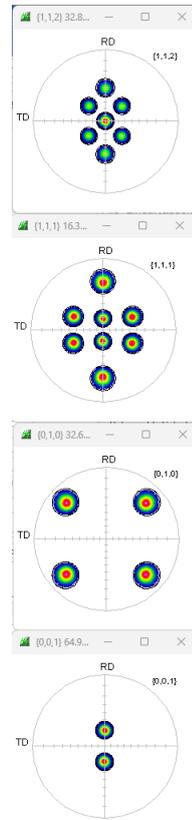
Ather(h,k,l) 1 4 4 001

Set Apend Clear

PoleFigure Disp

FWHM 0.025 < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho Disp

Exit



指数部分は等高線変更画面で入力

9 Orthorhombic

stereoGP 1.22T[25/12/31] by CTR

File Help

Material: Polyethylene

7.4 4.93 2.54 90.0 90.0 90.0

3Axis Nortation: 0 1 1 1 0 0 Set

4Axis Nortation: 0 0 0 1 2 -1 -1 0 Set

Calculate Index

PoleFigure: All All3 **All4** HexaAll

hksave hkload

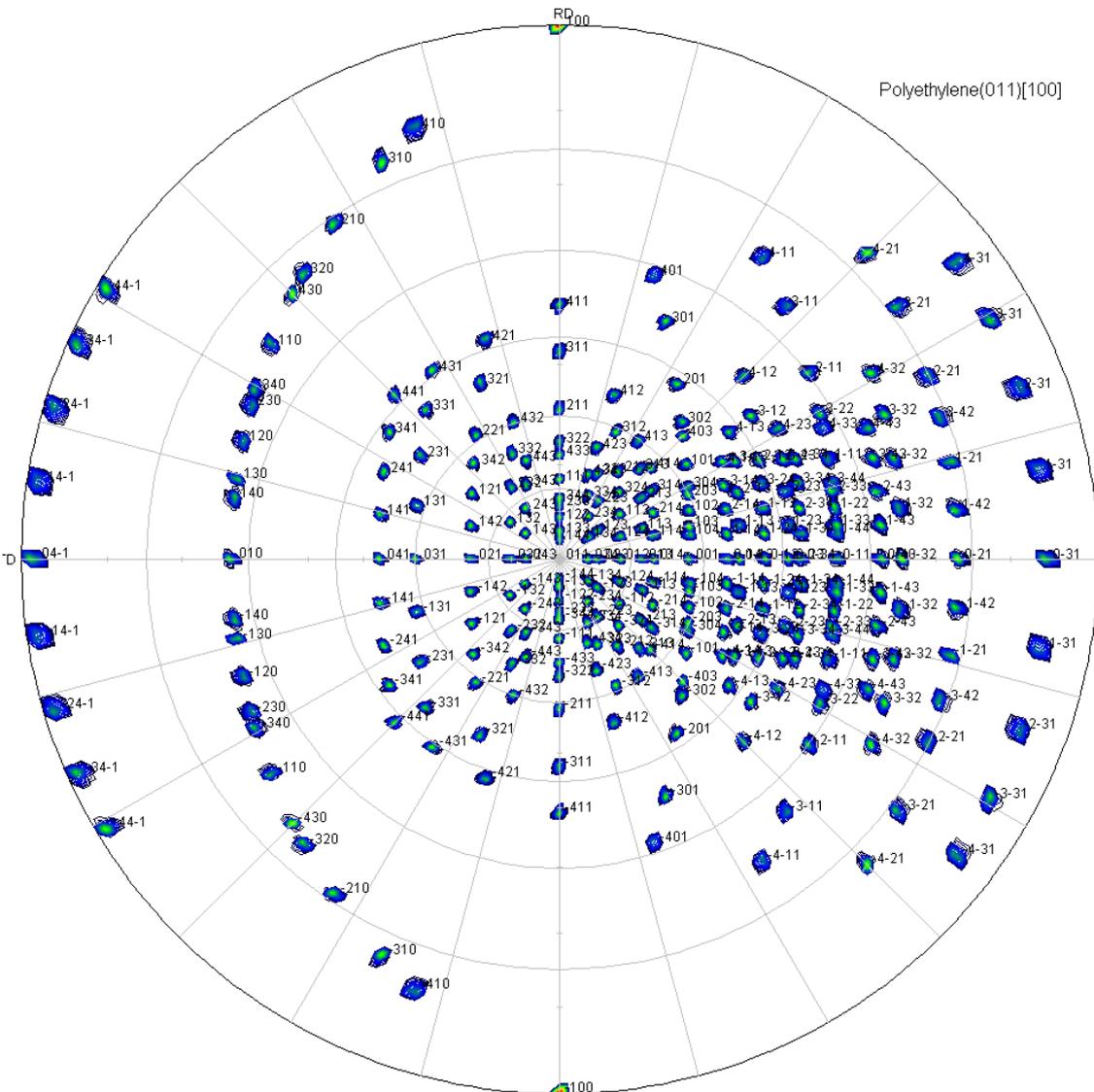
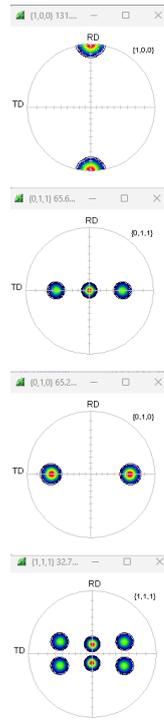
Ather(h,k,l) 1,1,1 001

Set Apend Clear

PoleFigure Disp

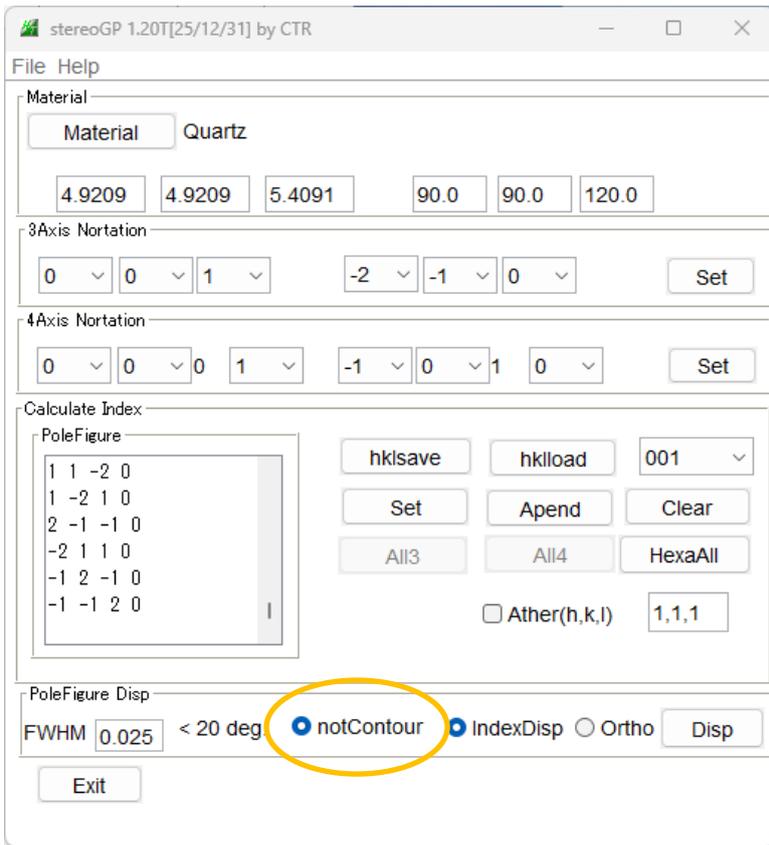
FWHM 0.025 < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho Disp

Exit

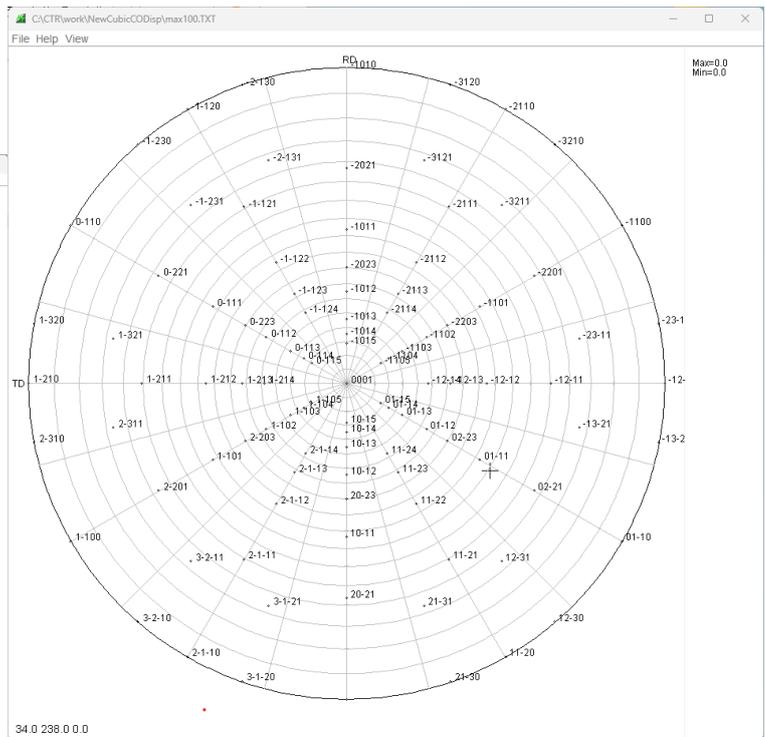
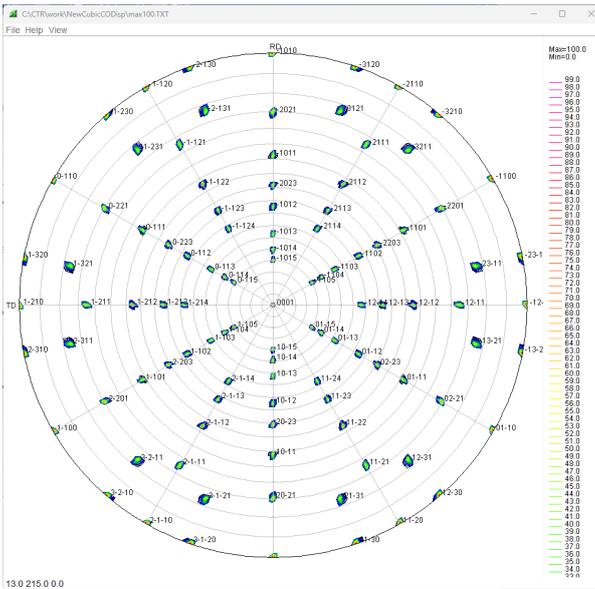


指数部分は等高線変更画面で入力

10. 等高線をドットにし描画の高速化



等高線計算を行わない設定



11. Cubic

操作画面の変更を行っています。

The screenshot shows the 'stereoGP 1.21T[25/12/31] by CTR' window. The 'Material' section is set to 'A-Iron-Measure-IntegralData'. The lattice parameters are 2.8664, 2.8664, 2.8664, and the angles are 90.0, 90.0, 90.0. The '3Axis Nortation' is set to (0, 0, 1) and (1, 0, 0). The '4Axis Nortation' is set to (0, 0, 0, 1) and (2, -1, 1, 0). The 'Calculate Index' section has a 'PoleFigure' window, buttons for 'All', 'All3', 'All4', 'HexaAll', 'hklsave', 'hklload', 'Ather(h,k,l)' (unchecked), '1,1,1', '001', 'Set', 'Apend', and 'Clear'. The 'PoleFigure Disp' section has 'FWHM' set to 0.025, '< 20 deg.', and radio buttons for 'notContour', 'IndexDisp' (selected), and 'Ortho'. An 'Exit' button is at the bottom.

PoleFigure Disp
FWHM 0.025 < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho Disp

等高線、指数表示,Triclinic 表示

PoleFigure Disp
FWHM 0.025 < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho Disp

等高線表示で Orthorhombic 表示

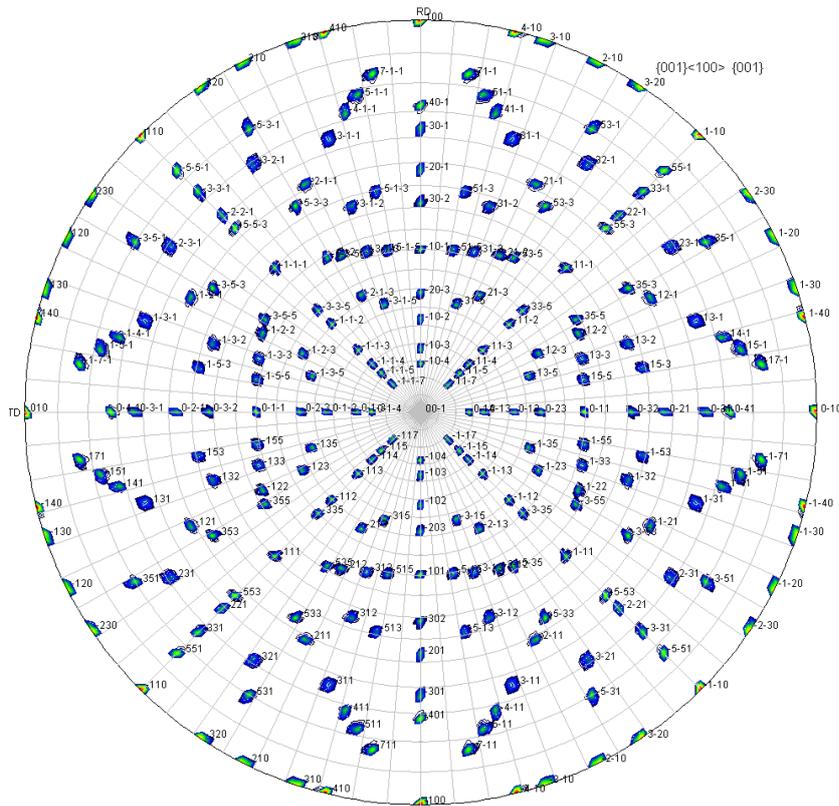
PoleFigure Disp
FWHM 0.025 < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho Disp

等高線なし、最小丸表示、指数表示、Triclinic 表示

11.1 Cubic (001) [100]

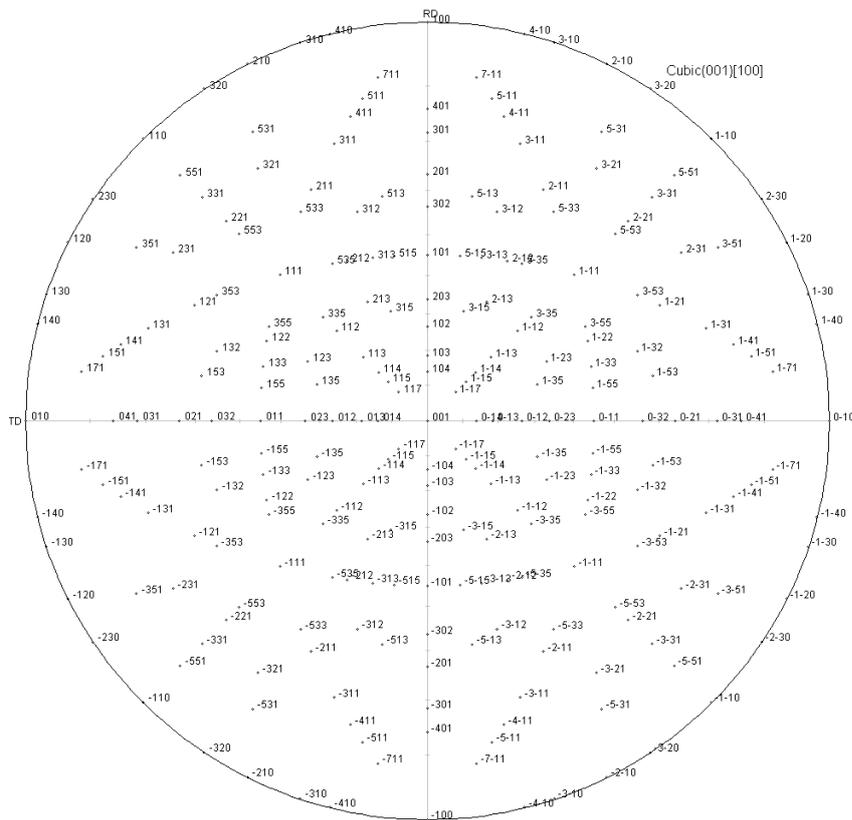
PoleFigure Disp

FWHM < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho



PoleFigure Disp

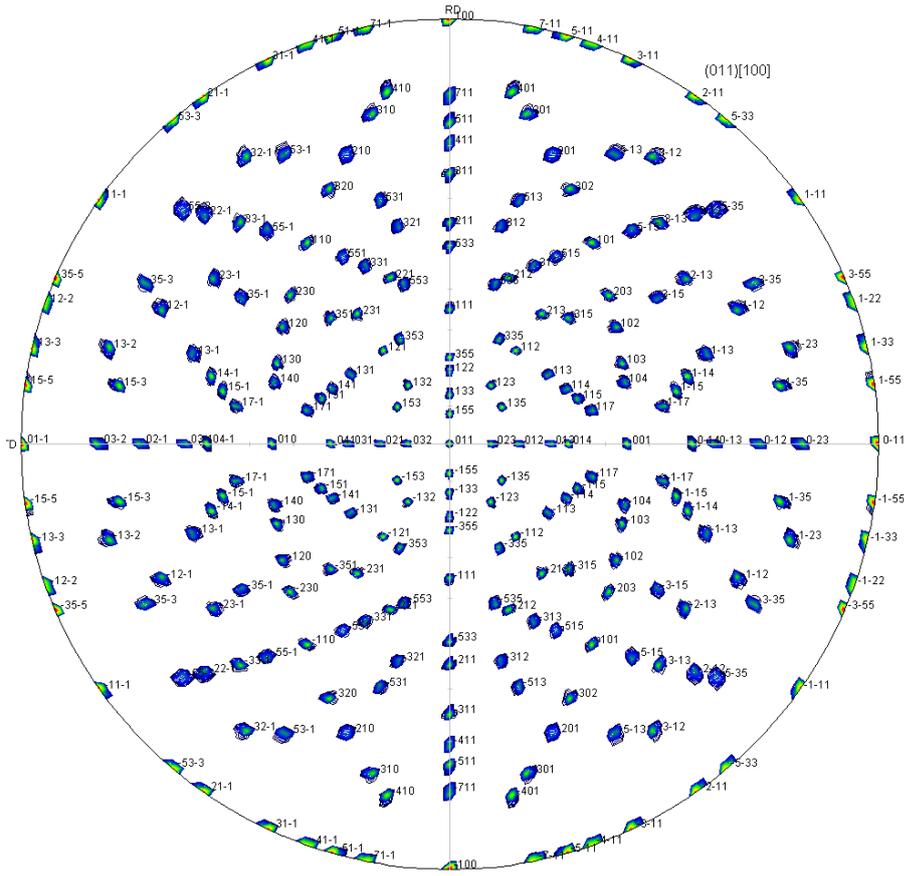
FWHM < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho



1 1. 2 Cubic (110) [001]

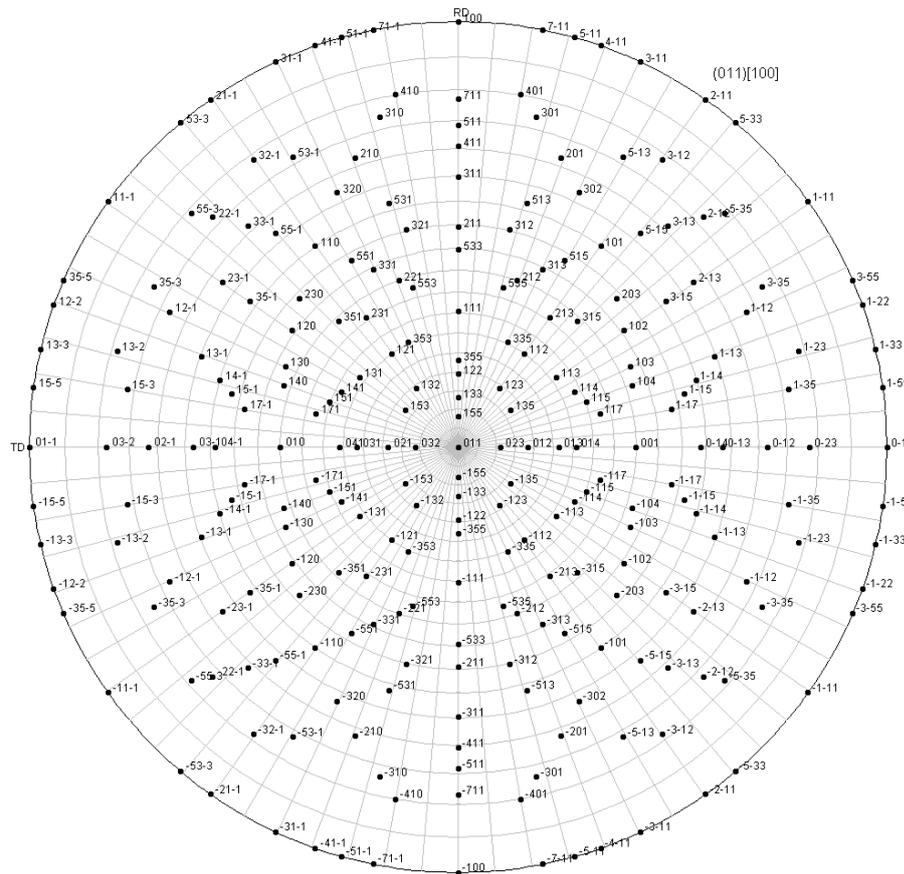
PoleFigure Disp

FWHM < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho

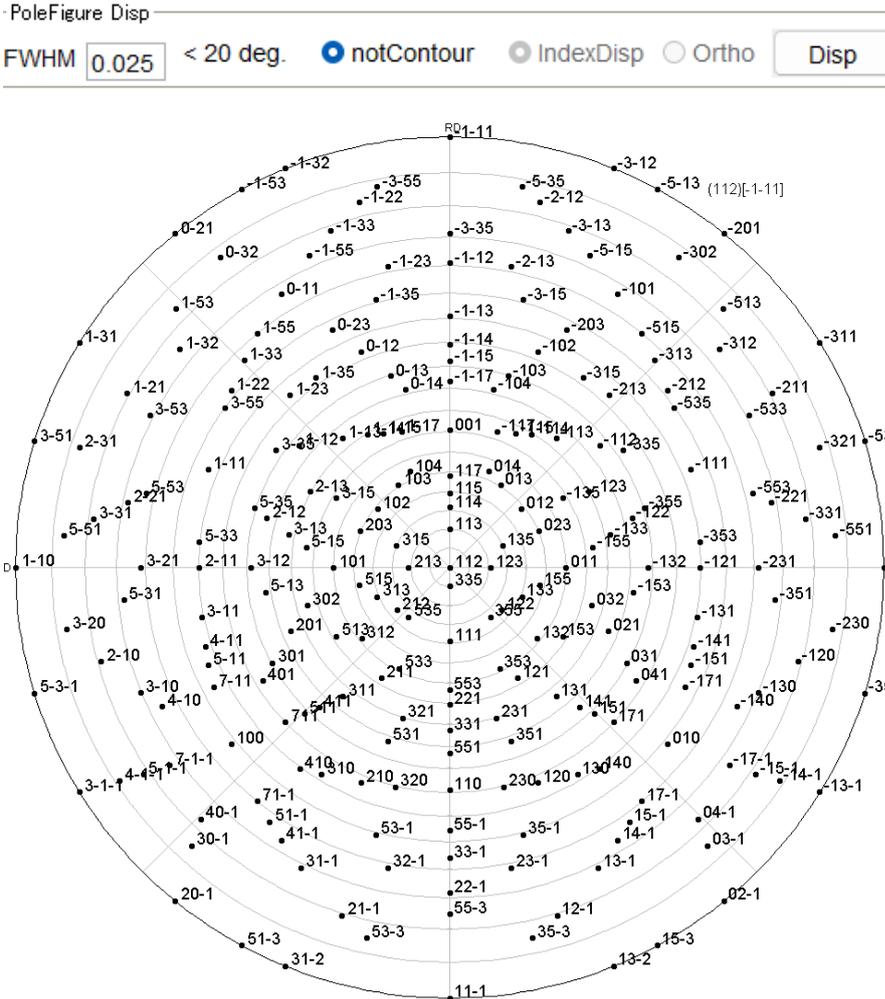
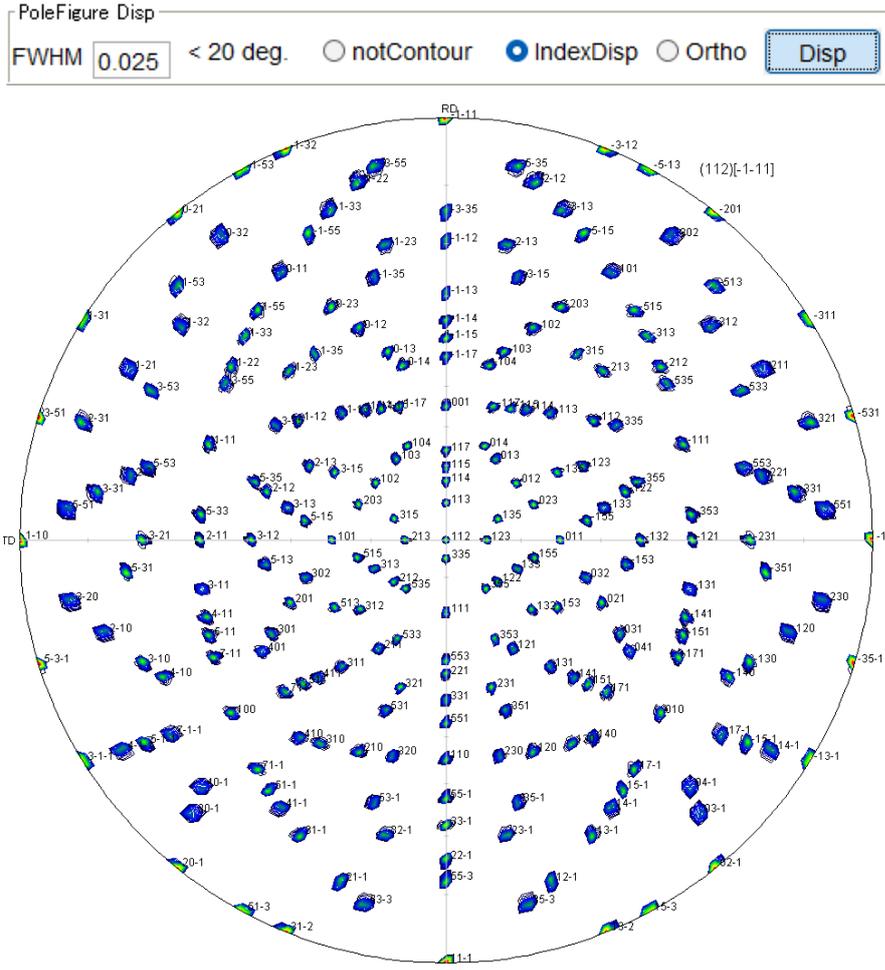


PoleFigure Disp

FWHM < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho

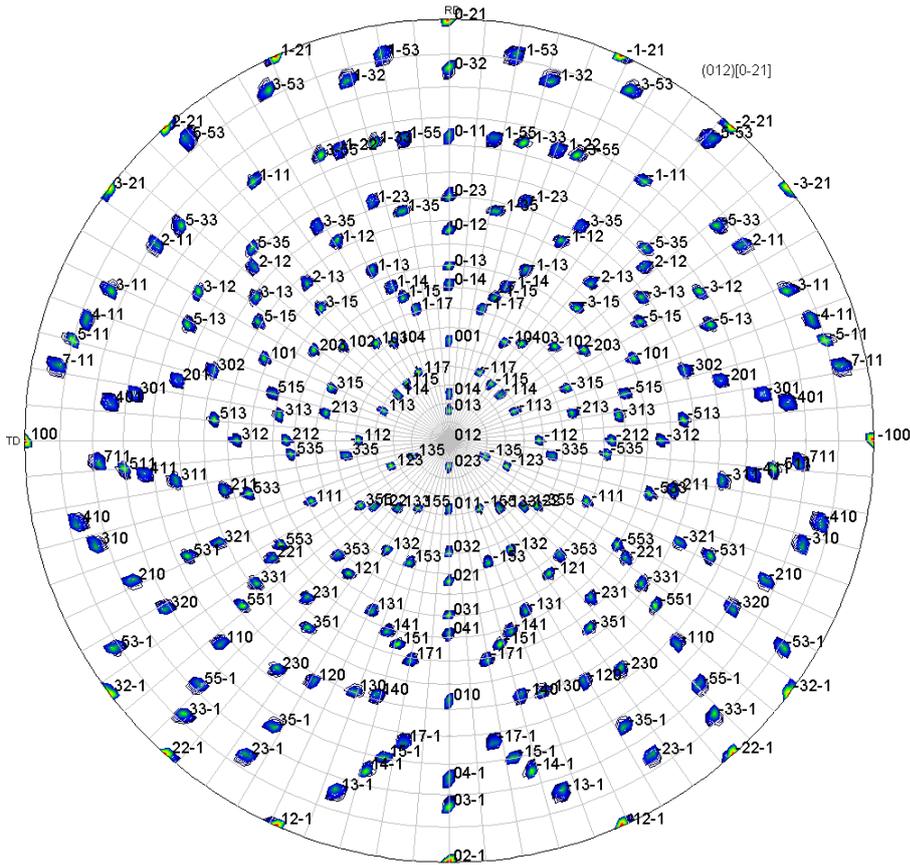


1 1 . 4 (1 1 2) [- 1 - 1 1]



1 1 . 5 (0 1 2) [0 - 2 1]

PoleFigure Disp
FWHM < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho



PoleFigure Disp
FWHM < 20 deg. notContour IndexDisp Ortho

