

ラウエ解析のチュートリアル

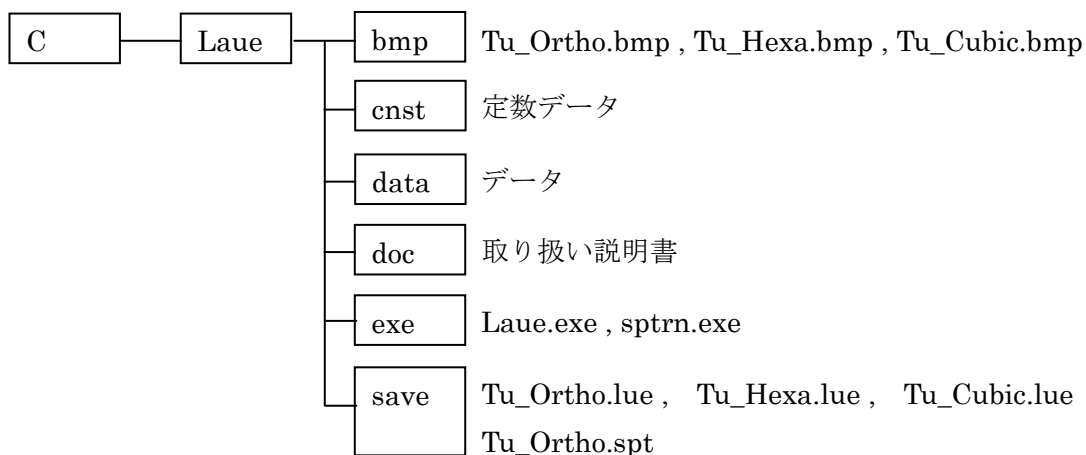
目次

1. プログラムのインストールと起動	P 1
1. 1 プログラムをインストールする。	P 1
1. 2 プログラムの起動	P 2
2. データの解析	P 2
2. 1 原点決めが「フィルム枠」の場合	P 2
2. 2 原点決めが「中心」の場合	P 6
2. 3 原点決めが「十字」の場合	P 1 0
3 シミュレーションデータの作成	P 1 4

1. プログラムのインストールと起動。

1. 1 プログラムをインストールする。

ラウエ解析プログラムを展開するドライブ（例えば C:）またはフォルダーをきめ、その下に CD-R から Laue のフォルダーごとコピーする。



(1) exe フォルダ

下記プログラムを格納している。

- **Laue.exe**
ラウエ解析 プログラム
- **sptrn.exe**
ラウエパターン・ステレオ投影図作成プログラム

(2) bmp フォルダ

ラウエパターンを bmp 形式ファイルで、下記を格納している。

- **Tu_Ortho.bmp**
斜方晶のラウエパターン。「ラウエパターン・ステレオ投影図作成プログラム」により作られたシミュレーションデータ。(3. 章 参照)

- Tu_Hexa.bmp
六方晶のラウエパターン。 透過法、CCD により撮影された実測データ。
- Tu_Cubic.bmp
立方晶のラウエパターン。 反射法、ポラロイド写真により撮影された実測データ。

(3) save フォルダ

- lue 形式ファイル
bmp フォルダ内の bmp ファイルのラウエパターンの解析結果を、.lue のファイル形式で持つ。
「ラウエ解析 プログラム」上で、lue 形式ファイルを読んで解析結果を再現出来る。
- spt 形式ファイル
「ラウエパターン・ステレオ投影図作成プログラム」の操作内容を退避したもの。
このプログラム上で、spt 形式ファイルを読んで操作内容を再現出来る。

1. 2 プログラムの起動

Laue.exe をダブルクリックし、プログラムを起動する。



2. データの解析

2. 1 原点決めが「フィルム枠」の場合

Tu_Ortho.bmp は「ラウエパターン・ステレオ投影図作成プログラム」により作られたシュミレーションデータで、斜方晶のラウエパターンである。(3. 章 参照)
このデータは「フィルム枠」で原点決めされる。

(1) 解析条件を復元する。

メインメニューの「ファイル」→「退避ファイルを開く」をクリックして save フォルダの Tu_Ortho.lue ファイルを開く。

(2) bmp ファイルを読み込む。

メインメニューの「ファイル」→「BMP ファイルを開く」をクリックして bmp フォルダの Tu_Ortho.bmp ファイルを開く。

(3) パラメータ入力を確認する。

メインメニューの「パラメータ入力」をクリックして、「パラメータ入力」ダイアログを立ち上げ、パラメータを確認する。パラメータを変更せず、「終了」ボタンをクリックする。

パラメータ入力

サンプル名 Orthorhombic

ユーザ名 N.teramae

格子定数(Å)

a: 1.000 α: 90.000

b: 1.200 β: 90.000

c: 1.400 γ: 90.000

原点決め

十字 フィルム枠 中心
(mm) (ピクセル)

縦長: 100.00

横幅: 100.00

フィルム間距離(mm): 30.00

主HKL面: 0 0 1

フィルム位置

背面反射法 任意位置反射

透過法 任意位置透過

フィルム回転位置: °

反射制限 反射の型と条件...

円筒フィルム 半径: 0.0 mm

最大反射指数: Group1: 8 Group2: 7

デジタル点数: 6

双晶

パラメータ決定

終了

パラメータ決定し、反射球を作成しました。

(4) 測定データ読み込み

メインメニューの「測定読込」をクリックして、「測定データ読み込み」ダイアログを立ち上げ、測定データを確認する。確認後、「測定デジタル化」ボタンをクリックし、「測定データデジタル化」ダイアログを立ち上げる。

測定データ読み込み

切り取り決定

切り取りクリア

そのまま決定

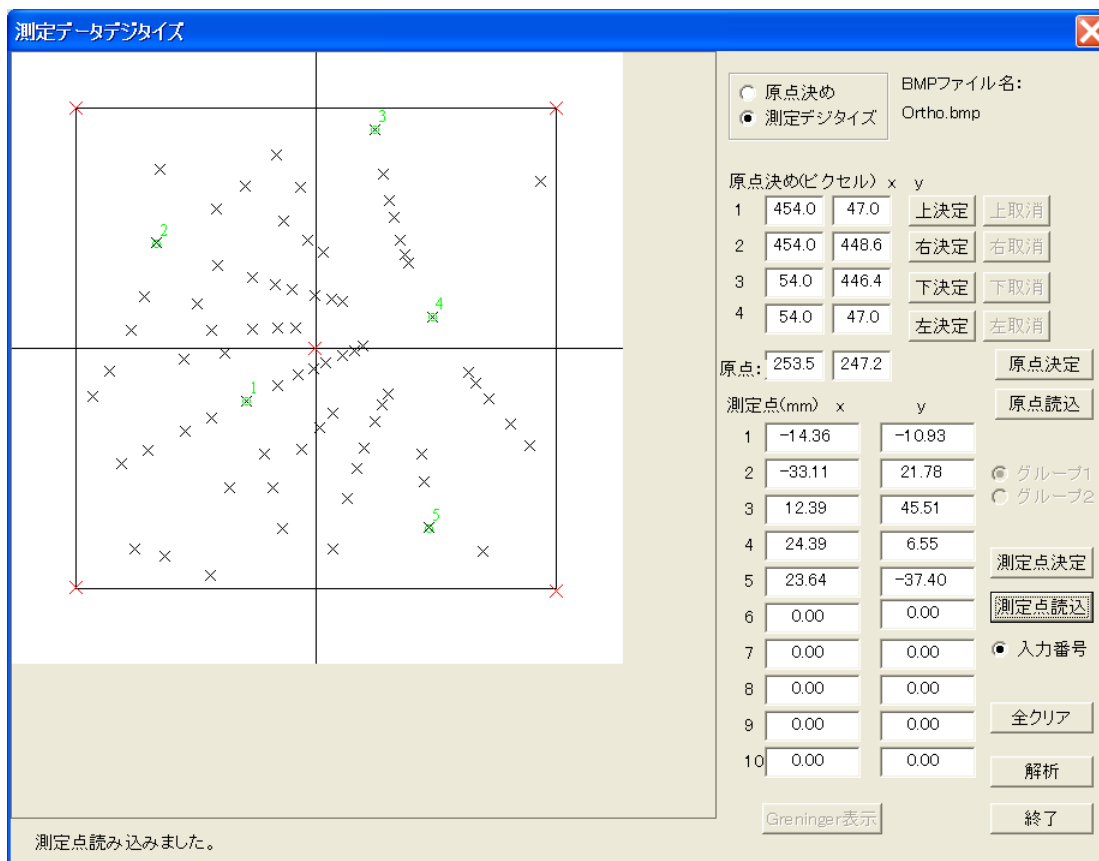
測定デジタル化

終了

(5) 原点とデジタイズ点を確認する。

「測定データデジタイズ」ダイアログ表示されるので、「原点読込」ボタンをクリックし原点を確認する。 また「測定点読込」ボタンをクリックしデジタイズ点を確認する。

「解析」ボタンをクリックし、「ラウエ解析」のダイアログを立ち上げる。



(6) 検索を実行する。

「ラウエ解析」のダイアログが表示されるので「候補検索」ボタンをクリックする。

選択番号1番のまま、「画面表示」ボタンをクリックし、「パターン表示」ダイアログを立ち上げる。

(「計算結果」ボタンも同様に行う。)

ラウエ解析

予備角: 15.0 deg 検索制限時間: 60 秒
 解析誤差: 1.0 deg 候補検索 候補数: 30 次候補表示 フィルム距離誤差: 5 %

番号	hkl	誤差	Psi	Theta	Phi
1	-1 0 2 -1 1 2 0 2 5 0 0 1 -1 -2 5	0.07	14.87	20.07	10.18
2	1 0 2 1 -1 2 0 -2 5 0 0 1 1 2 5	0.07	14.87	20.07	-169.82
3	1 0 2 1 -1 2 0 -3 7 0 0 1 1 2 5	0.45	13.56	20.12	-169.02
4	-1 0 2 -1 1 2 0 3 7 0 0 1 -1 -2 5	0.45	13.56	20.12	10.98
5	-1 -2 6 -1 0 3 0 2 7 1 0 5 1 -2 4	0.54	67.84	9.91	-79.46
6	1 2 6 1 0 3 0 -2 7 -1 0 5 -1 2 4	0.54	67.84	9.91	100.54
7	2 0 3 1 -1 3 0 0 1 1 2 6 2 2 3	0.59	74.22	28.64	166.30
8	-2 0 3 -1 1 3 0 0 1 -1 -2 6 -2 -2 3	0.59	74.22	28.64	-13.70
9	0 0 1 1 0 3 2 -3 5 0 -3 5 -1 -1 3	0.61	-144.67	15.97	-102.45
10	0 0 1 -1 0 3 -2 3 5 0 3 5 1 1 3	0.61	-144.67	15.97	77.55

選択番号: 1 計算結果 画面表示 中止 終了

候補があがりました。番号を選択し計算結果ボタンを押して下さい。検索時間:0秒

(7) ラウエ解析の結果を確認する。

「パターン表示」ダイアログが表示される。

パターン表示

ファイル名: Ortho.bmp

HKL: -1 0 2

HKL max: 8

2. 2 原点決めが「中心」の場合

Tu_Hexa.bmp は透過法、CCDにより撮影された実測データで、六方晶のラウエパターンである。
このデータは「中心」で原点決めされる。

(1) 解析条件を復元する。

メインメニューの「ファイル」→「退避ファイルを開く」をクリックして save フォルダの
Tu_Hexa.lue ファイルを開く。

(2) bmp ファイルを読み込む。

メインメニューの「ファイル」→「BMP ファイルを開く」をクリックして bmp フォルダの
Tu_Hexa.bmp ファイルを開く。

(3) パラメータ入力を確認する。

メインメニューの「パラメータ入力」をクリックして、「パラメータ入力」ダイアログを立ち上げ、
パラメータを確認する。パラメータを変更せず、「終了」ボタンをクリックする。

パラメータ入力

サンプル名: Hexagonal

ユーザ名: N.Teramae

格子定数(Å)

a: 4.519 α: 90.000

b: 4.519 β: 90.000

c: 7.357 γ: 120.000

Group2 Group1 Group2

最大反射指数: 8 7

デジタイズ点数: 6

反射制限 反射の型と条件...

原点決め

十字 フィルム枠 中心
(mm) (ピクセル)

縦長: 50.00 512

横幅: 50.00 512

フィルム間距離(mm): 33.84

主HKL面: 5 1 2

フィルム位置

背面反射法 任意位置反射

透過法 任意位置透過

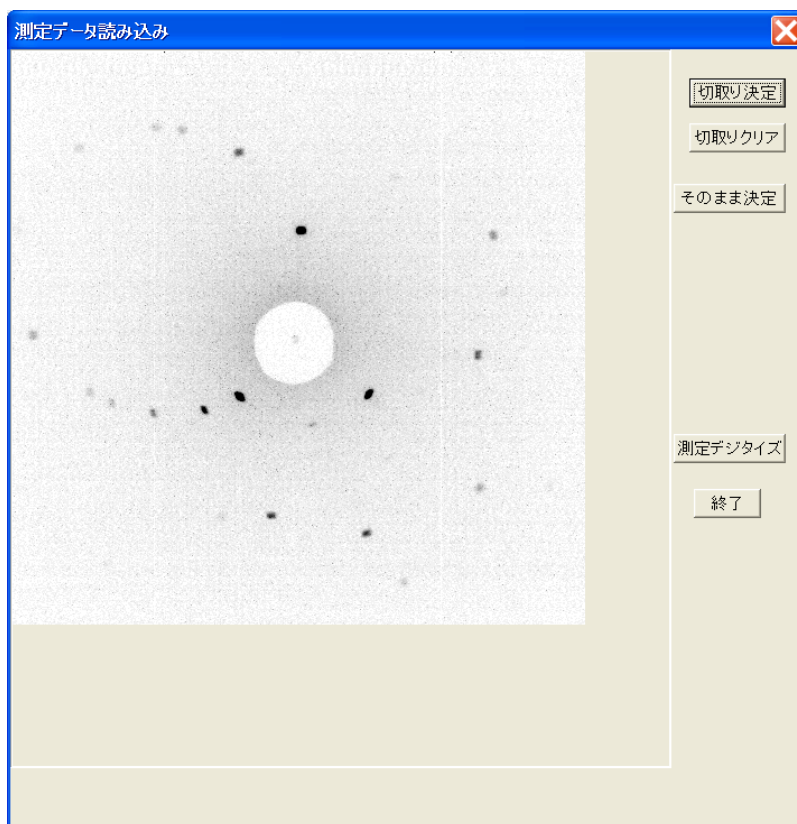
フィルム回転位置: °

円筒フィルム 半径: 0.0 mm

双晶 パラメータ決定 終了

(4) 測定データ読み込み

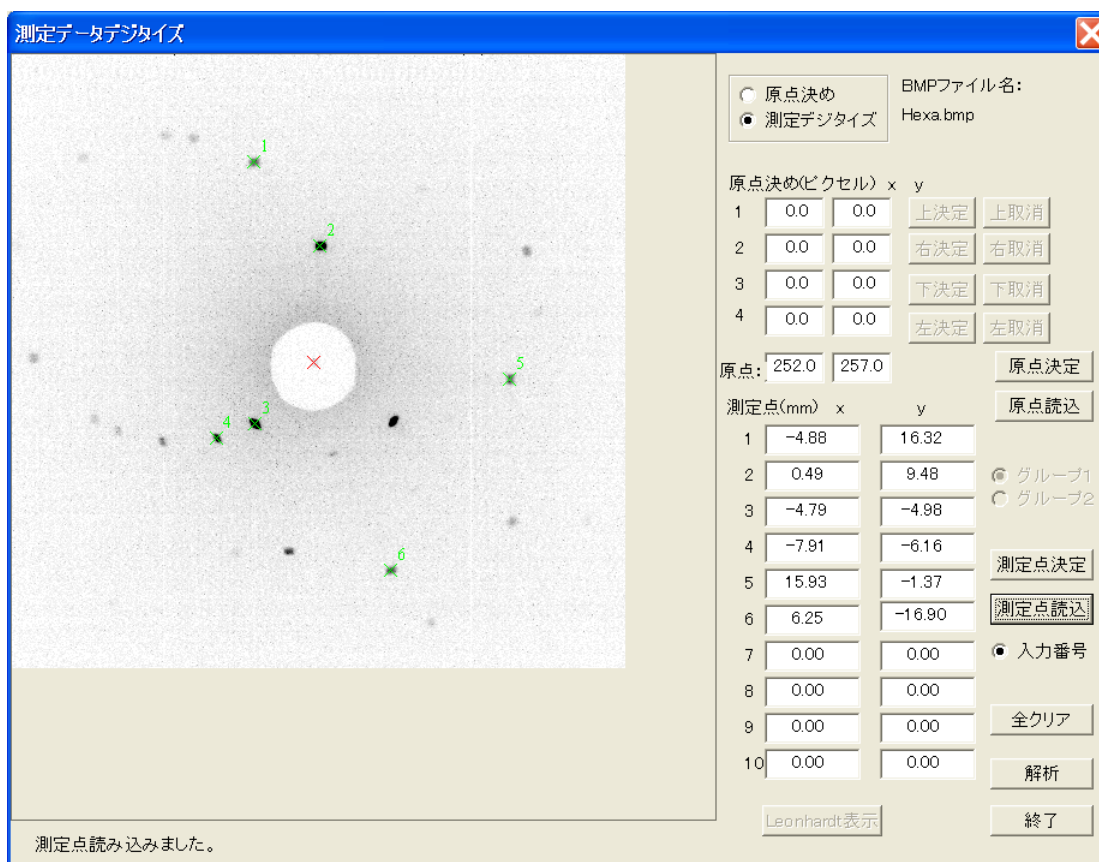
メインメニューの「測定読込」をクリックして、「測定データ読み込み」ダイアログを立ち上げ、測定データを確認する。確認後、「測定デジタイズ」ボタンをクリックし、「測定データデジタイズ」ダイアログを立ち上げる。



(5) 原点とデジタイズ点を確認する。

「測定データデジタイズ」ダイアログ表示されるので、「原点読込」ボタンをクリックし原点を確認する。 また「測定点読込」ボタンをクリックしデジタイズ点を確認する。

「解析」ボタンをクリックし、「ラウエ解析」のダイアログを立ち上げる。

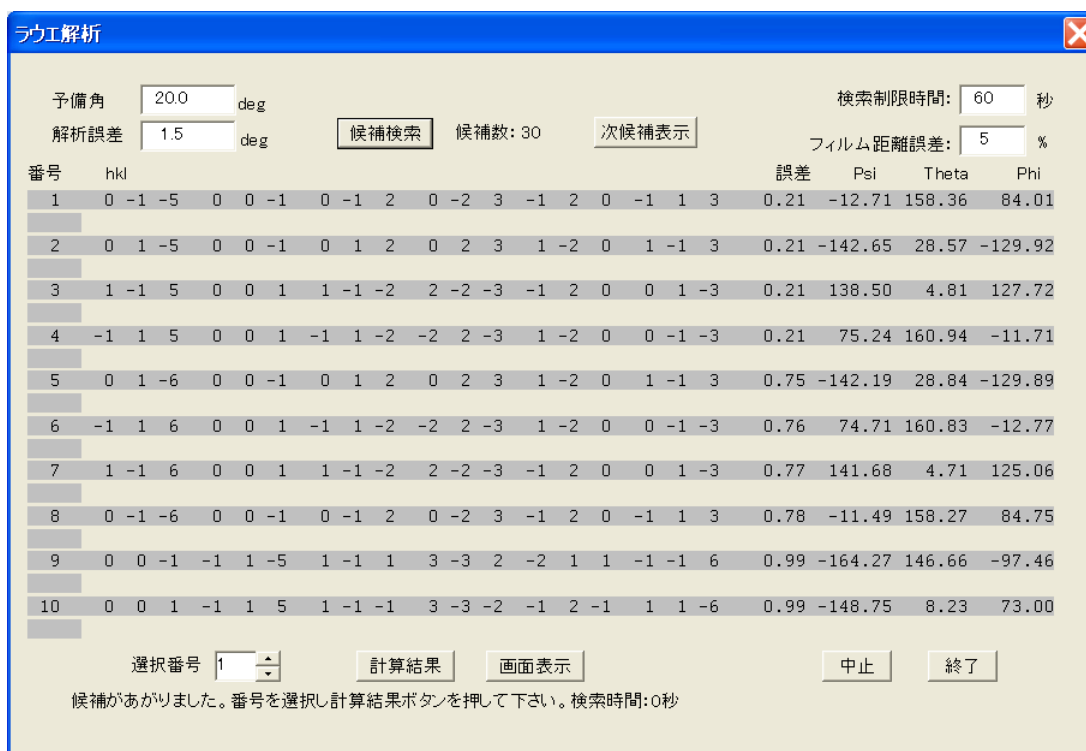


(6) 検索を実行する。

「ラウエ解析」のダイアログが表示されるので「候補検索」ボタンをクリックする。

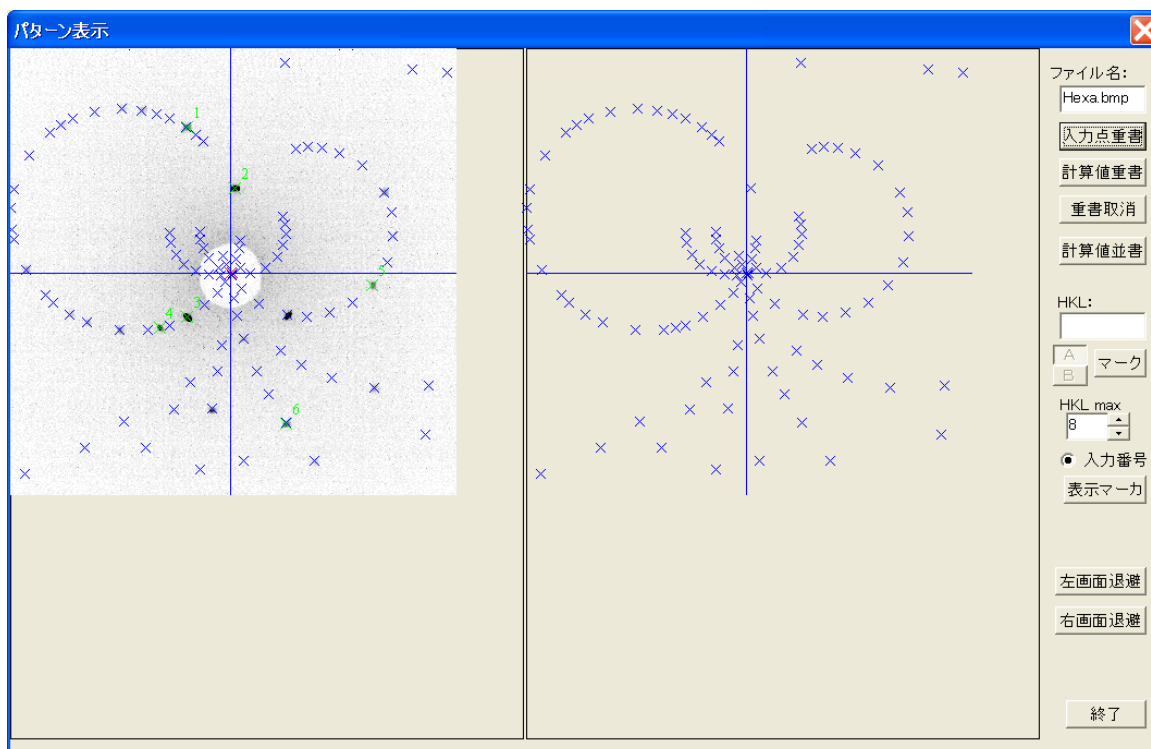
選択番号1番のまま、「画面表示」ボタンをクリックし、「パターン表示」ダイアログを立ち上げる。

(「計算結果」ボタンも同様に行う。)



(7) ラウエ解析の結果を確認する。

「パターン表示」ダイアログが表示される。



2. 3 原点決めが「十字」の場合

Tu_Cubic.bmp は反射法、ポラロイド写真により撮影された実測データで、立法晶のラウエパターンである。

このデータは「十字」で原点決めされる。

(1) 解析条件を復元する。

メインメニューの「ファイル」→「退避ファイルを開く」をクリックして save フォルダの Tu_Cubic.lue ファイルを開く。

(2) bmp ファイルを読み込む。

メインメニューの「ファイル」→「BMP ファイルを開く」をクリックして bmp フォルダの Tu_Cubic.bmp ファイルを開く。

(3) パラメータ入力を確認する。

メインメニューの「パラメータ入力」をクリックして、「パラメータ入力」ダイアログを立ち上げ、パラメータを確認する。パラメータを変更せず、「終了」ボタンをクリックする。

パラメータ入力

サンプル名 Cubic

ユーザ名 N.teramae

格子定数(Å)

a: 1.200 α : 90.000

b: 1.200 β : 90.000

c: 1.200 γ : 90.000

Group2 Group1 Group2

最大反射指数: 7 7

デジタイズ点数: 6

反射制限 反射の型と条件...

原点決め

十字 フィルム枠 中心
(mm) (ピクセル)

縦長: 25.40

横幅: 25.40

フィルム間距離(mm): 32.00

主HKL面: 1 1 1

フィルム位置

背面反射法 任意位置反射

透過法 任意位置透過

フィルム回転位置: °

円筒フィルム 半径: 0.0 mm

双晶

パラメータ決定 終了

(4) 測定データ読み込み

メインメニューの「測定読込」をクリックして、「測定データ読み込み」ダイアログを立ち上げ、測定データを確認する。確認後、「測定デジタイズ」ボタンをクリックし、「測定データデジタイズ」ダイアログを立ち上げる。

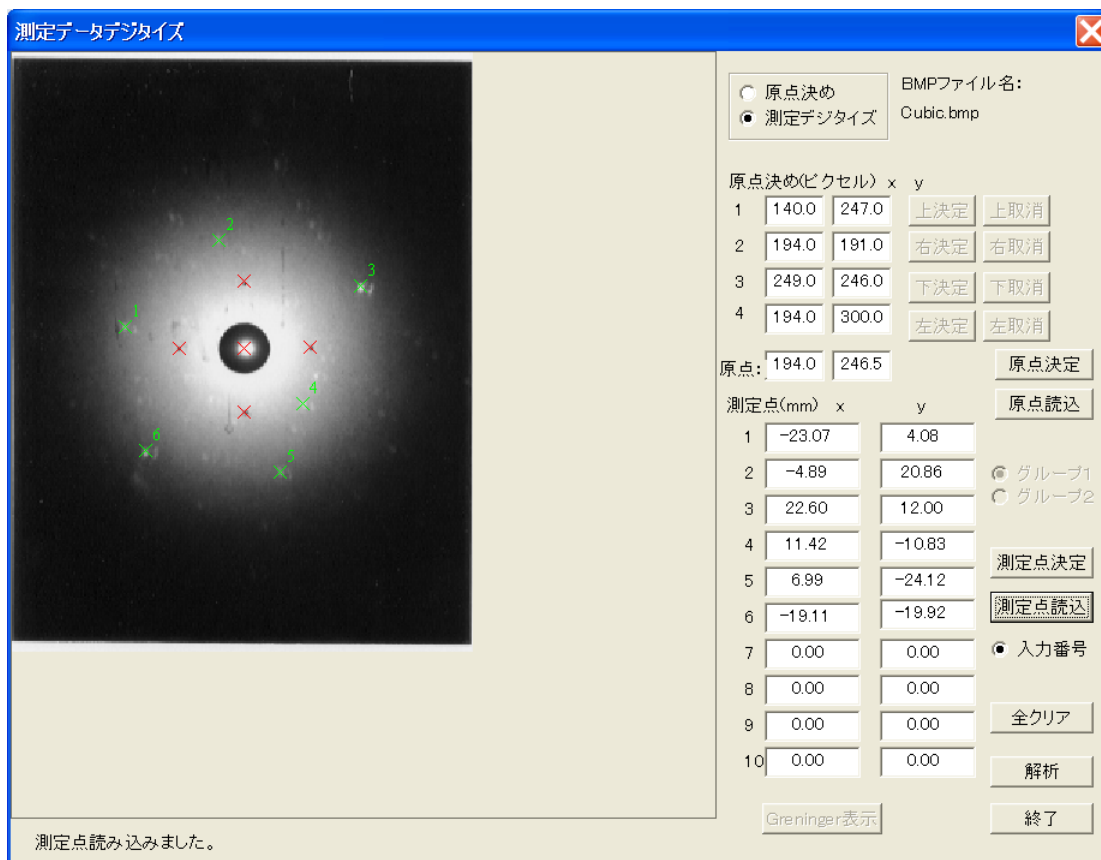


注) このダイアログを使って写真が切り取りされているので、次の「測定データデジタイズ」ダイアログでは、写真は拡大されている。

(5) 原点とデジタイズ点を確認する。

「測定データデジタイズ」ダイアログ表示されるので、「原点読込」ボタンをクリックし原点を確認する。 また「測定点読込」ボタンをクリックしデジタイズ点を確認する。

「解析」ボタンをクリックし、「ラウエ解析」のダイアログを立ち上げる。



(6) 検索を実行する。

「ラウエ解析」のダイアログが表示されるので「候補検索」ボタンをクリックする。

選択番号1番のまま、「画面表示」ボタンをクリックし、「パターン表示」ダイアログを立ち上げる。

(「計算結果」ボタンも同様に行う。)

ラウエ解析

予備角 deg 検索制限時間: 秒
 解析誤差 deg 候補検索 候補数: 18 次候補表示 フィルム距離誤差: %

番号	hkl	誤差	Psi	Theta	Phi
1	1 1 0 3 2 1 1 1 1 1 2 1 1 3 1 1 2 0	0.18	27.70	19.28	160.55
2	0 1 1 1 3 2 1 1 1 1 1 2 1 1 3 0 1 2	0.18	27.70	19.28	40.55
3	1 0 1 2 1 3 1 1 1 2 1 1 3 1 1 2 0 1	0.18	27.70	19.28	-79.45
4	2 3 1 4 3 1 6 2 3 3 2 3 2 2 3 2 4 3	0.49	-91.44	8.46	-151.00
5	1 2 3 1 4 3 3 6 2 3 3 2 3 2 2 3 2 4	0.49	-91.44	8.46	89.00
6	3 1 2 3 1 4 2 3 6 2 3 3 2 3 2 4 3 2	0.49	-91.44	8.46	-31.00
7	3 1 4 2 0 5 0 1 6 1 3 6 1 3 4 3 3 4	0.65	-132.32	29.39	-1.04
8	4 3 1 5 2 0 6 0 1 6 1 3 4 1 3 4 3 3	0.65	-132.32	29.39	-121.04
9	1 4 3 0 5 2 1 6 0 3 6 1 3 4 1 3 4 3	0.65	-132.32	29.39	118.96
10	1 1 0 2 2 1 2 5 3 2 6 1 1 4 0 3 5 -1	0.70	74.17	28.35	148.17

選択番号 計算結果 画面表示 中止 終了

候補がありました。番号を選択し計算結果ボタンを押して下さい。検索時間:0秒

(7) ラウエ解析の結果を確認する。

「パターン表示」ダイアログが表示される。

パターン表示

ファイル名:

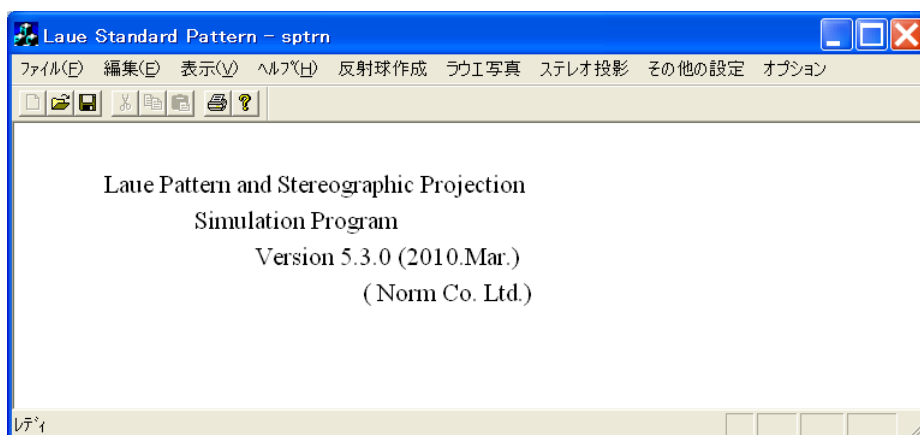
HKL:

HKL max:
 入力番号

3 シミュレーションデータの作成

(1) プログラムの起動

sptrn.exe をダブルクリックし、プログラムを起動する。

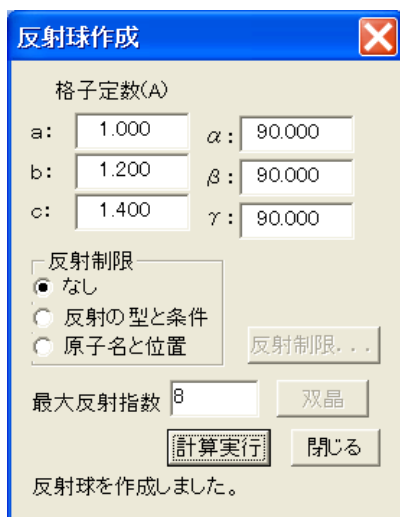


(2) シミュレーション条件を復元する。

メインメニューの「ファイル」→「退避ファイルを開く」をクリックして save フォルダの Tu_Ortho.spt ファイルを開く。

(3) 反射球作成

メインメニューの「反射球作成」をクリックして、「反射球作成」ダイアログを立ち上げ、パラメータを確認する。パラメータを変更せず、「閉じる」ボタンをクリックする。



(4) ラウエ写真のパラメータ入力

メインメニューの「ラウエ写真」をクリックして、「ラウエ写真パラメータ」ダイアログを立ち上げ、パラメータを確認する。 確認後、「表示」ボタンをクリックし、「ラウエパターン表示」ダイアログを立ち上げる。

ラウエ写真パラメータ

ラウエ写真 横 mm
 縦 mm
 試料カメラ間距離 mm

フィルム位置
 背面反射法 任意位置反射
 透過法 任意位置透過

フィルムの回転位置: °

円筒フィルム 半径: mm

指示方向 H K L
 ND:
 RD:

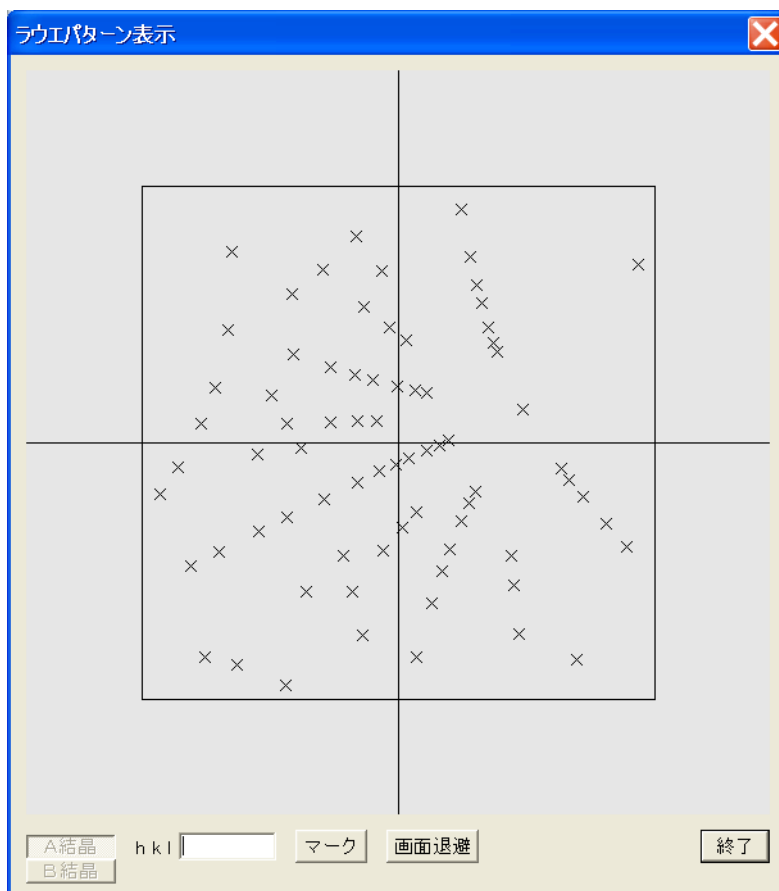
回転角: ψ θ ϕ

回転後方向 H K L
 ND: -0.2560 0.0542 1.0000
 TD: 1.0000 -0.5831 0.5448
 RD: 0.3733 1.0000 0.1136

NDとRDの作る角度は 90.00000°

(5) 画面表示と画面退避

「ラウエパターン表示」ダイアログが表示されるので「画面退避」ボタンをクリックする。
これにより、表示されているラウエパターンがクリップボードに貼り付く。



(6) 「ペイント」プログラムによる bmp ファイルの作成 (参考)

- Windows の「スタート」→「すべてのプログラム」→「アクセサリ」→「ペイント」で「ペイント」プログラムを起動する。
- メインメニューの「編集」→「貼りつけ」で (5) で退避した図が貼り付く。
「ツールボックス」の「選択」ボタンをクリックする。 512×512 ピクセル以内で、この値に近いエリアをマウスドラッグにより選択する。
- メインメニューの「編集」→「ファイルへコピー」で、フォルダ名、ファイル名を指定する。
bmp ファイルが出来上がる。