

Hexagonalにおける結晶方位の決定

非対称 ODF 図に対応

$\phi 1 : 0 \rightarrow 360$

$\Phi : 0 \rightarrow 90$

$\phi 2 : 0 \rightarrow 60$

2015年03月29日

HelperTex Office

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

不明な点がありましたら、問い合わせください

測定データ0 材料-MGYLaboTex-Export

目次

1. 概要
2. Euler 角度から $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ の計算
3. LaboTexExport データ
 - 3.1 A-type データを GPODFDisplay で読み込み
 - 3.2 B-type を選択した場合
4. (001)[uv0] ($\Phi=0.0$) の場合
5. ODF 図のステップ間隔が 5.0 以外の場合

1. 概要

ODF解析を行い $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ を決定する場合、ODF図から Euler 角度を読み込み結晶方位を決定する事になるが、六方晶の結晶方位表現は複雑である。

3 指数、4 指数、X 軸の取り方で表現方法は 4 種類ある。

この表現を簡単に纏めたソフトウェアが、HexaConvert ソフトウェアである。

又、ODF解析の Export 図から結晶方位を決定するソフトウェアが

GPODFDisplay ソフトウェアである。

本資料では、LaboTex の ODF Export ファイルから方位決定を説明します。

(他の ODF 図も対応しています)

使用するソフトウェアのバージョンは、

GPODFDisplay ソフトウェア 1. 1 3

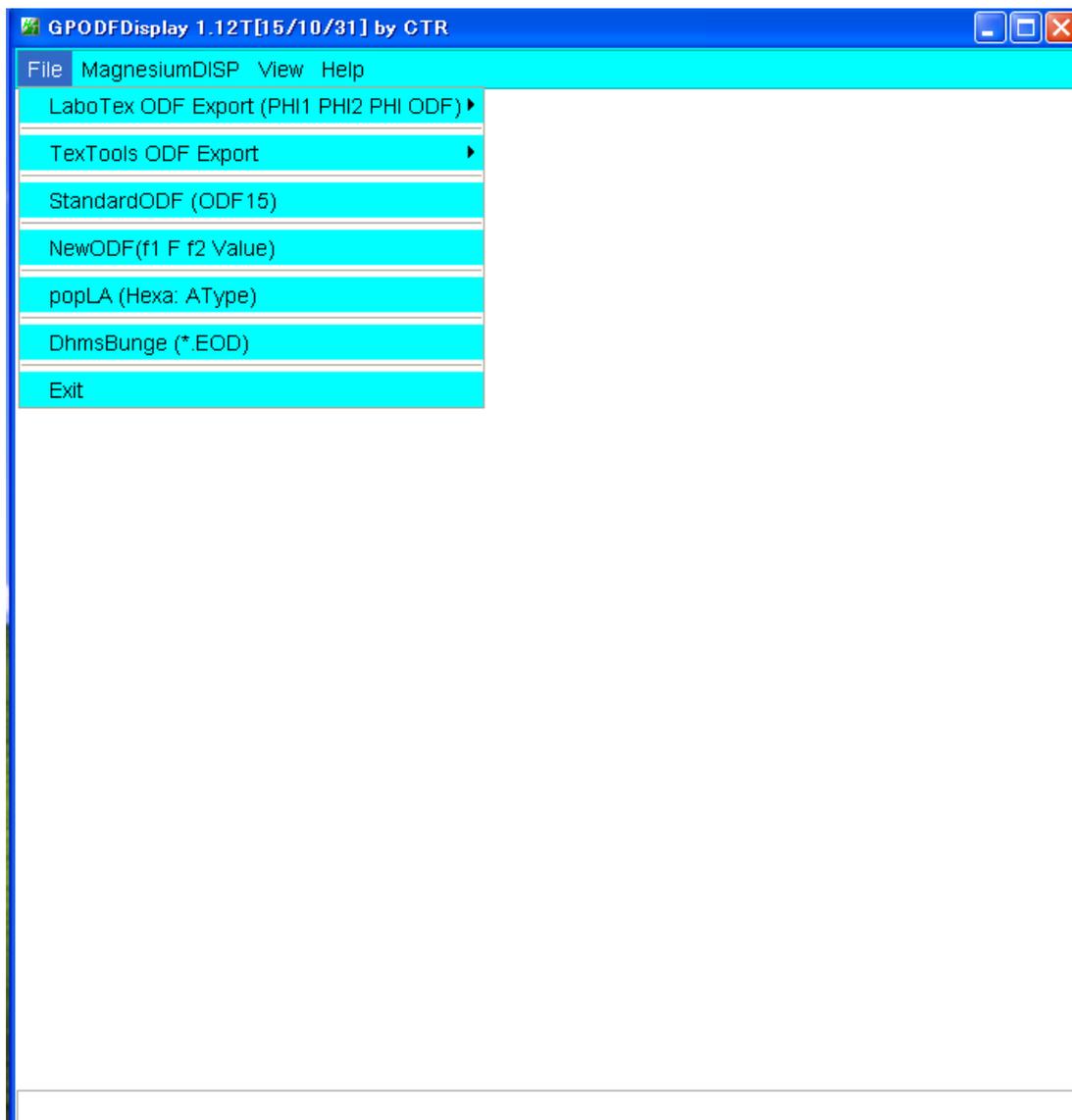
HexaConvert ソフトウェア 1. 0 8

Cubic, Tetragonal, Orthorombic の場合

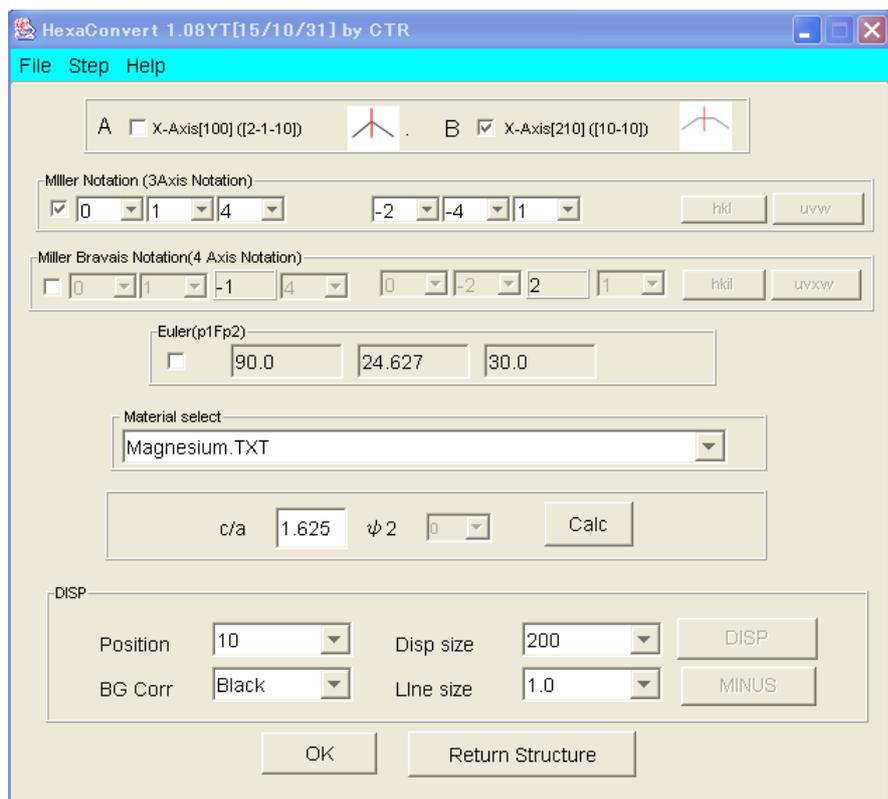
HexaConvert ソフトウェアの代わりに、

CrystalOrientationDisp ソフトウェア 2. 0 4

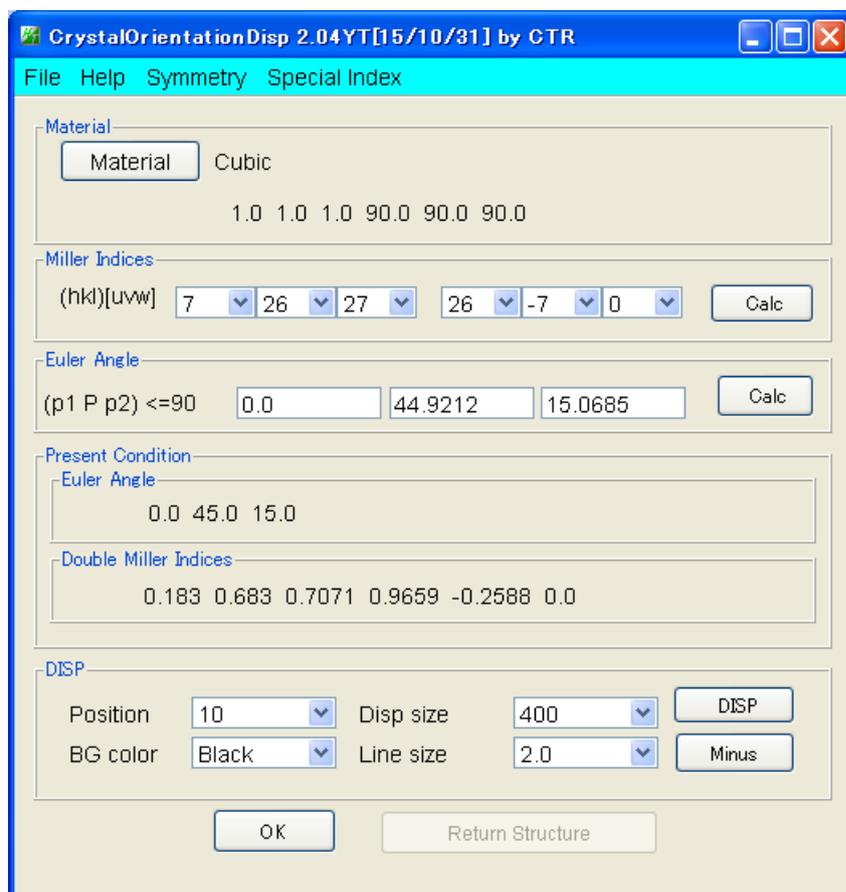
GPODFDisplay ソフトウェア



HexaConvertソフトウェア



CrystalOrientationソフトウェア



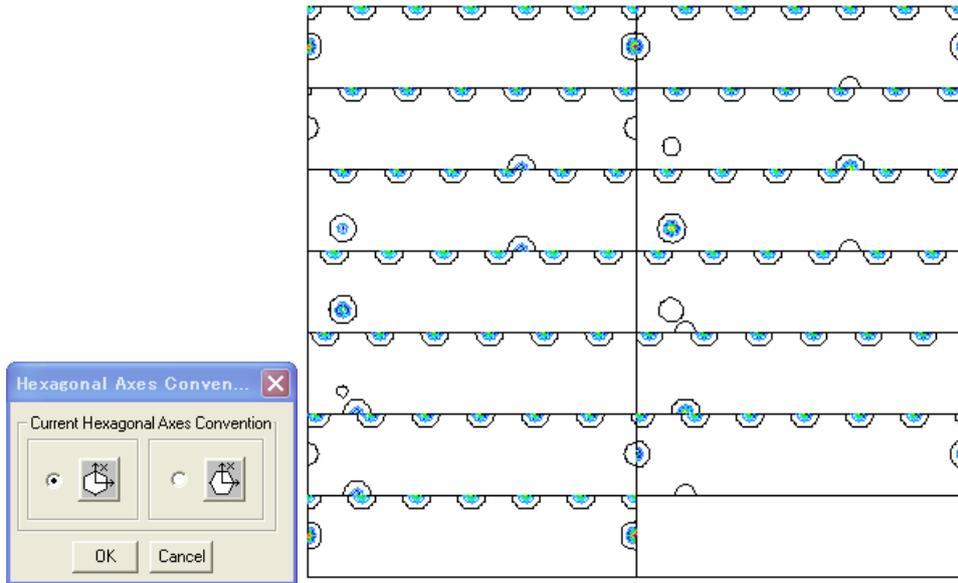
2. Euler角度から $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ の計算

Hexagonal

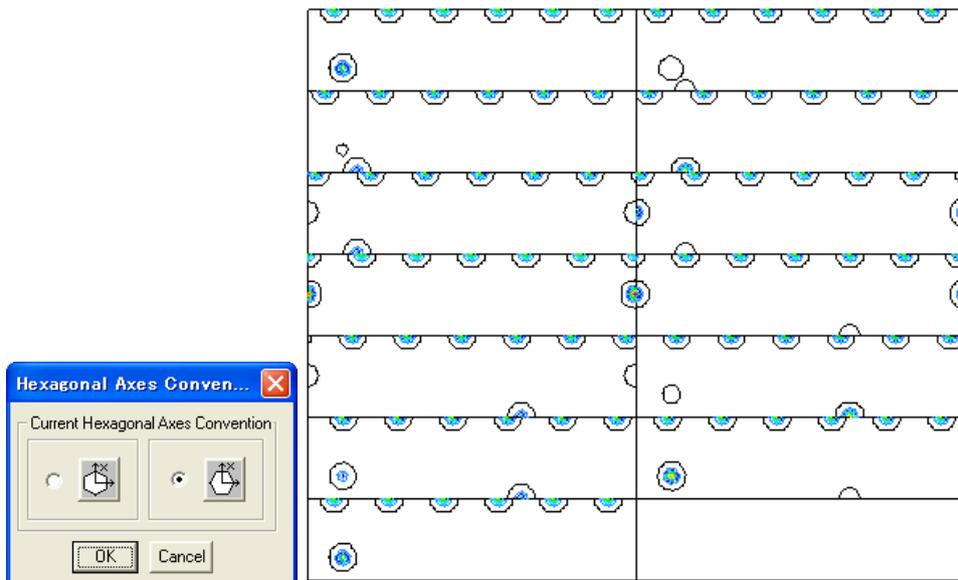
$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ i \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c/a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sin \phi_2 \sin \phi \\ \cos \phi_2 \sin \phi \\ \cos \phi \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix}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

3. LaboTexExportデータ

A-type (TexToolsも同じ)

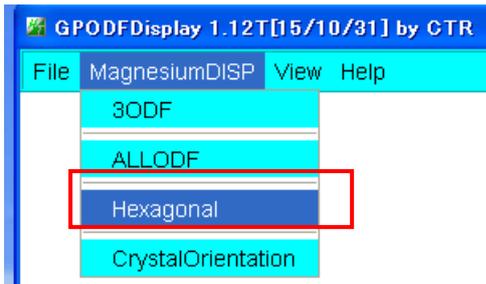


B-type

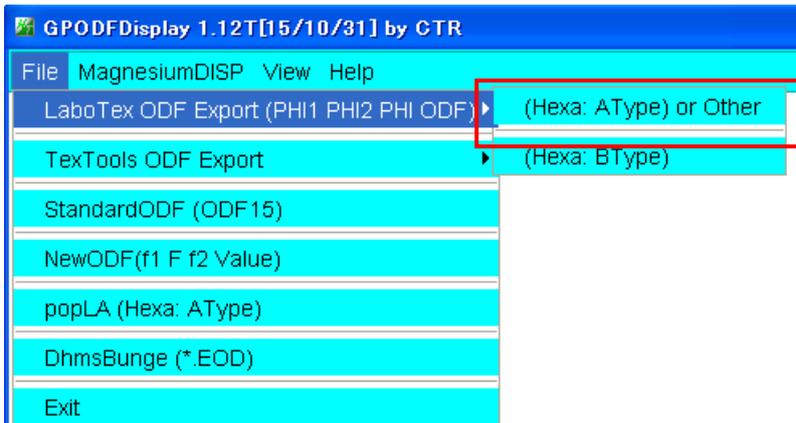


$$B\text{-type}(\phi_2) = A\text{-type}(\phi_2) + 30$$

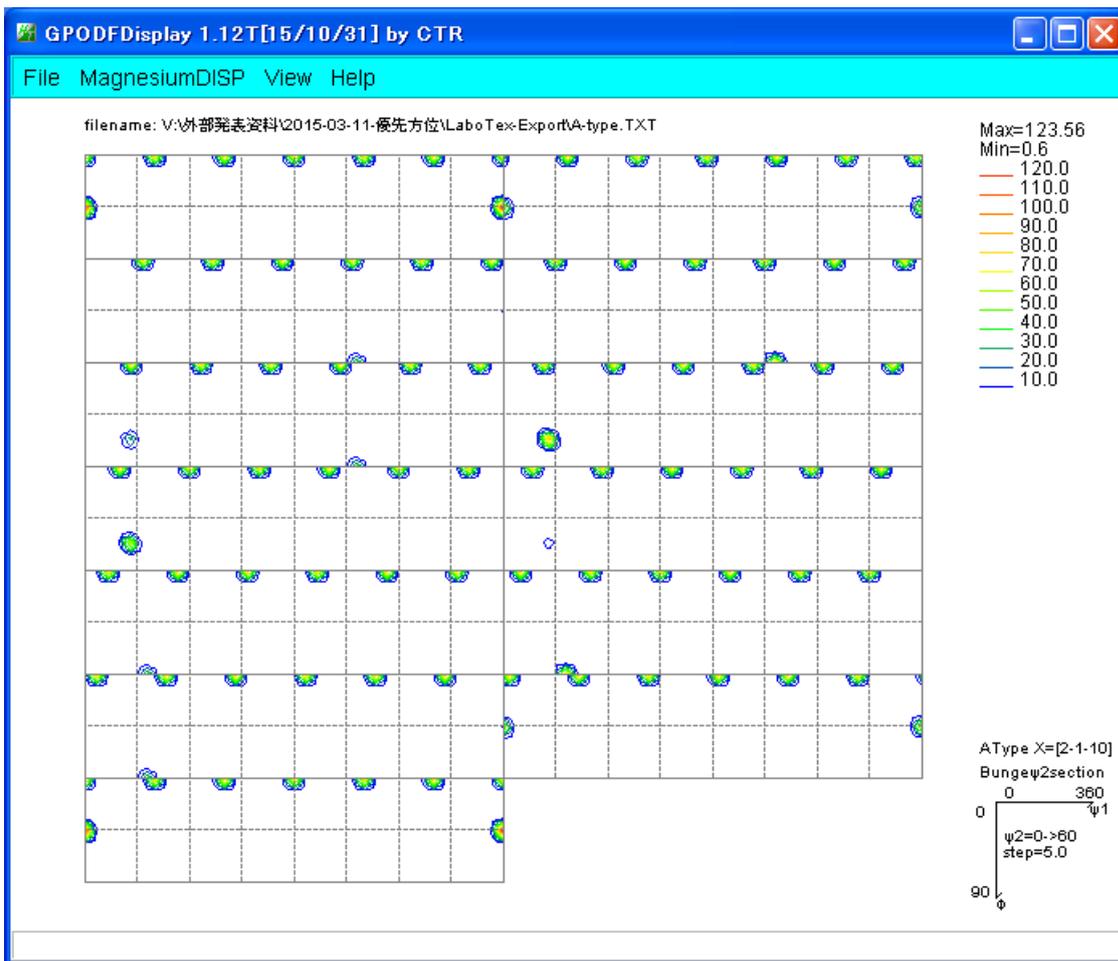
3. 1 A-typeデータをGPODFDisplayで読み込み
予め、材料を選択 (Magnesium)



LaboTexのATypeでExportされたA-Typew/p選択

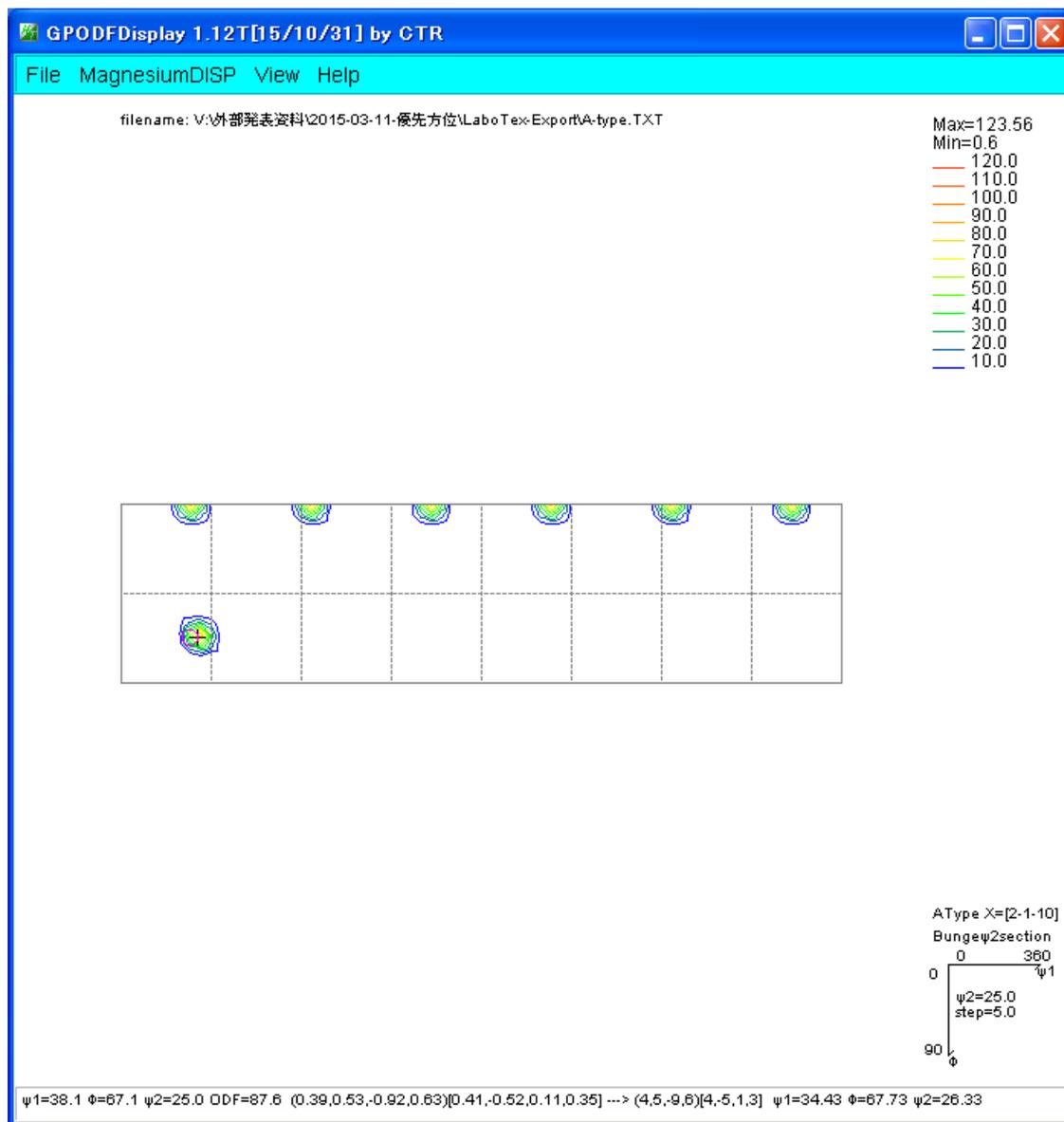


選択されたODF図が表示される



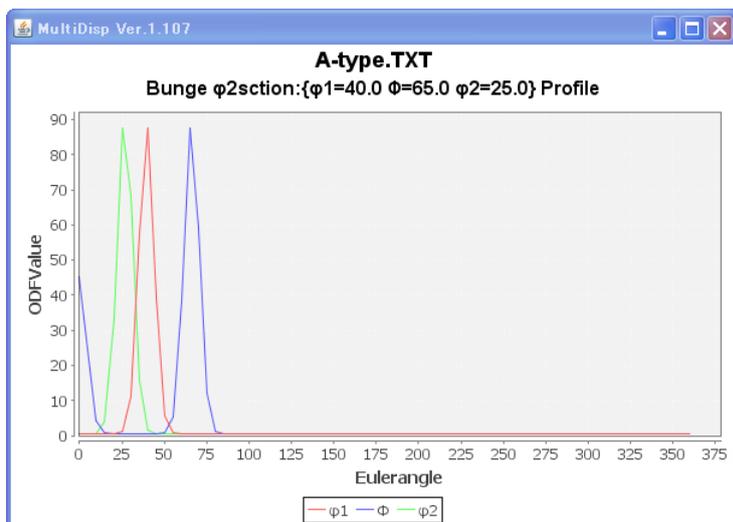
最大方位密度が表示されているφ2断面25度をマウスセンタボタンをクリック

最大方位密度位置をマウス左ボタンクリック



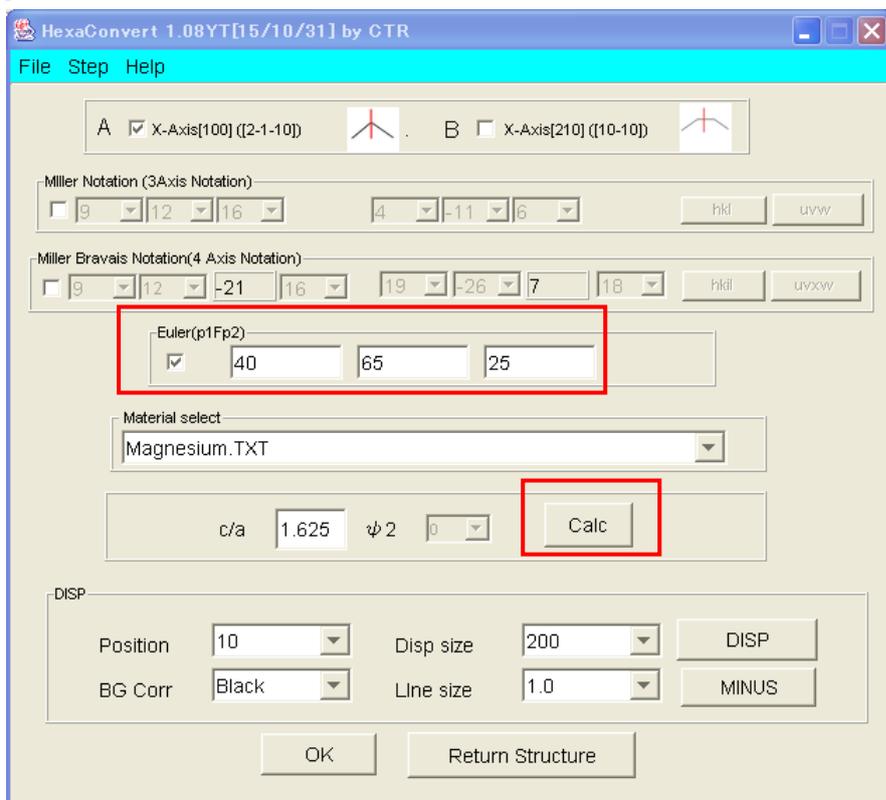
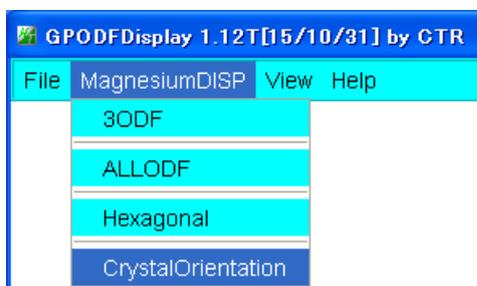
4 指数計算された結果が表示される。

最大位置あたりをマウス右クリックで



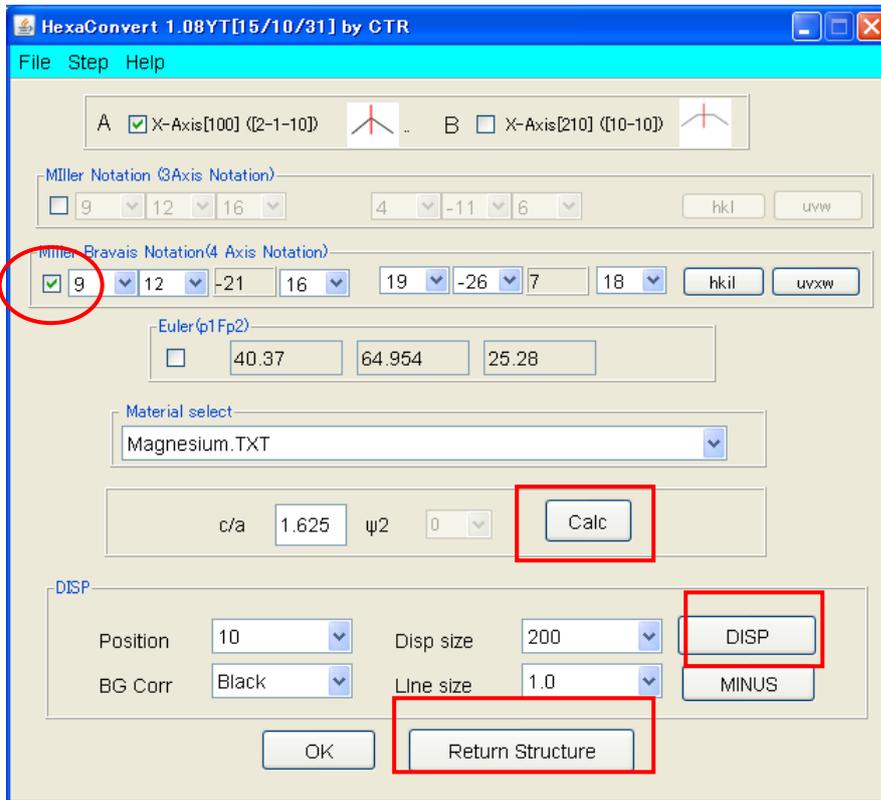
この Euler 角度位置の結晶方位を調べる場合、

ODF 図画面を全体表示に戻し、CrystalOrientation を選択

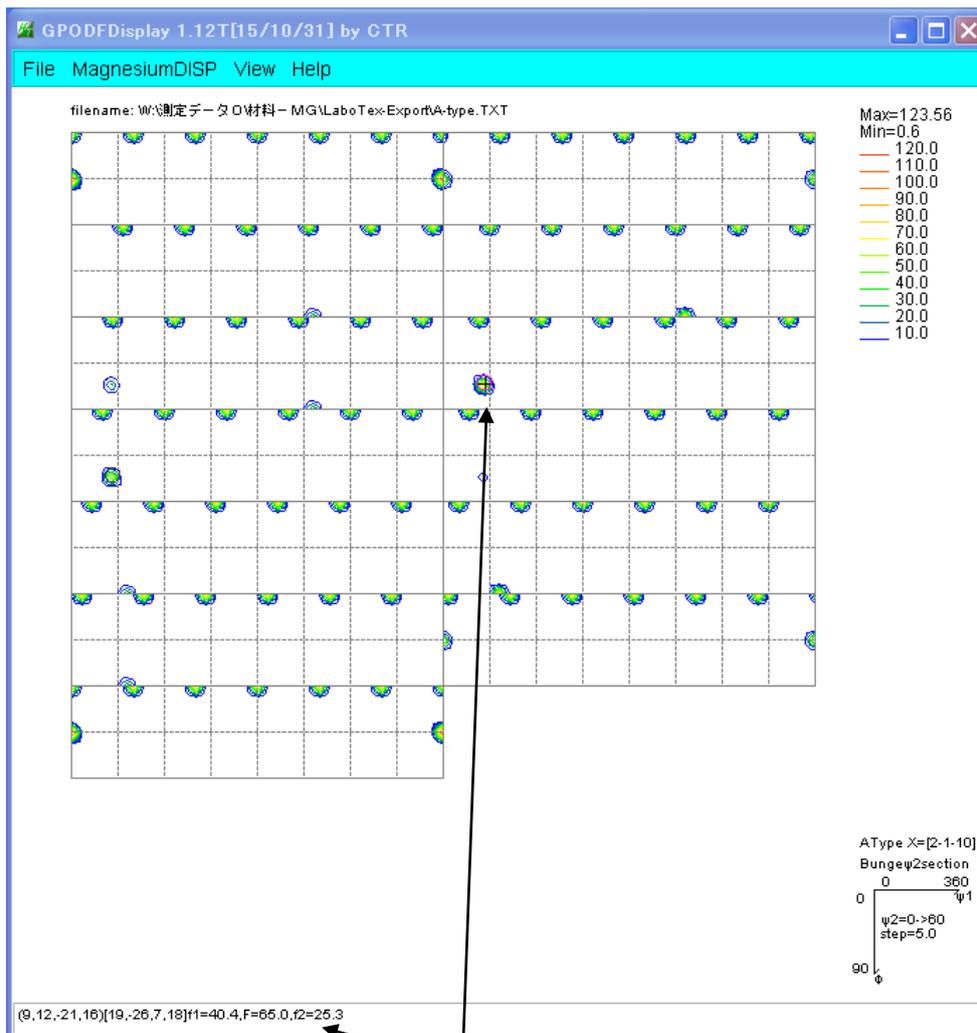


Euler 角度を入力、Calc で(hkl)[uvw]が計算される。

しかし、正数化された(hkl)[uvw]と Euler 角度が異なるため、(hkl)[uvw]から Euler 角度を計算する。



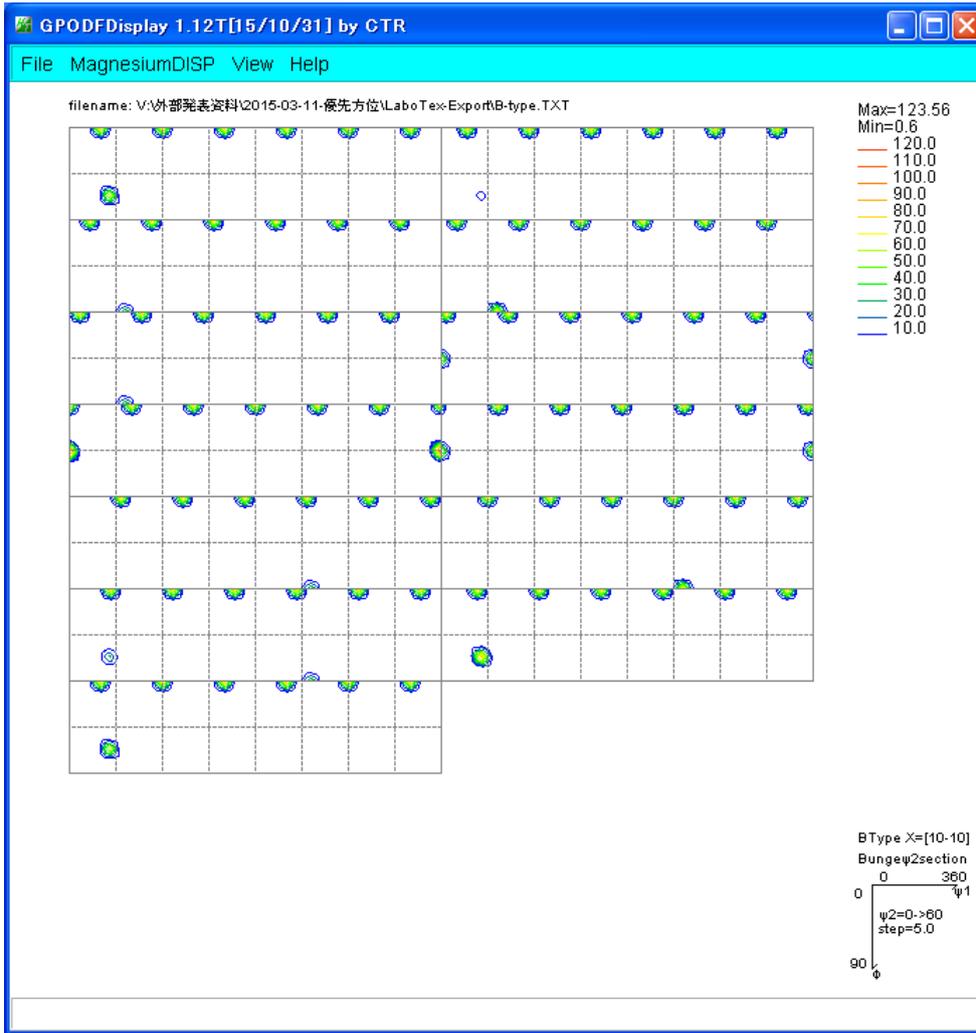
Dispで、結晶方位図が描画される事を確認してから、ReturnStructureを行います。



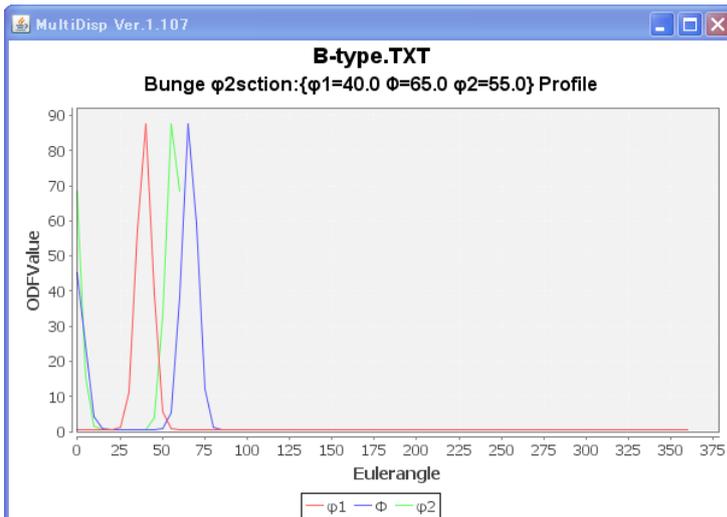
Euler角度から計算された $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ が表示される。

3. 2 B-typeを選択した場合

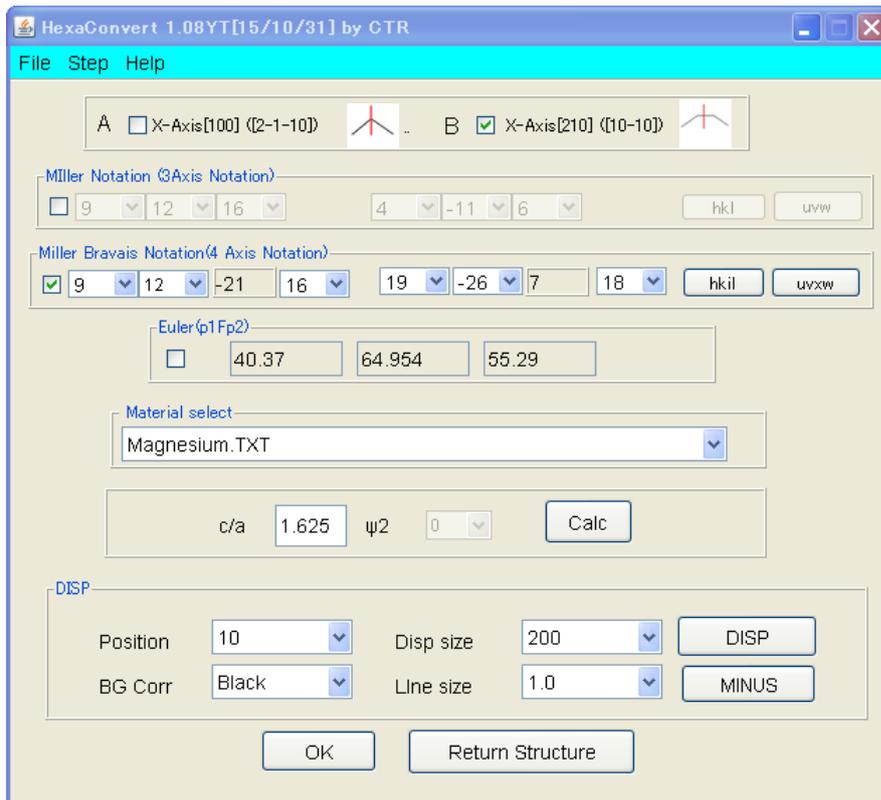
ϕ 2断面を考えると $BType = AType + 30$ である。



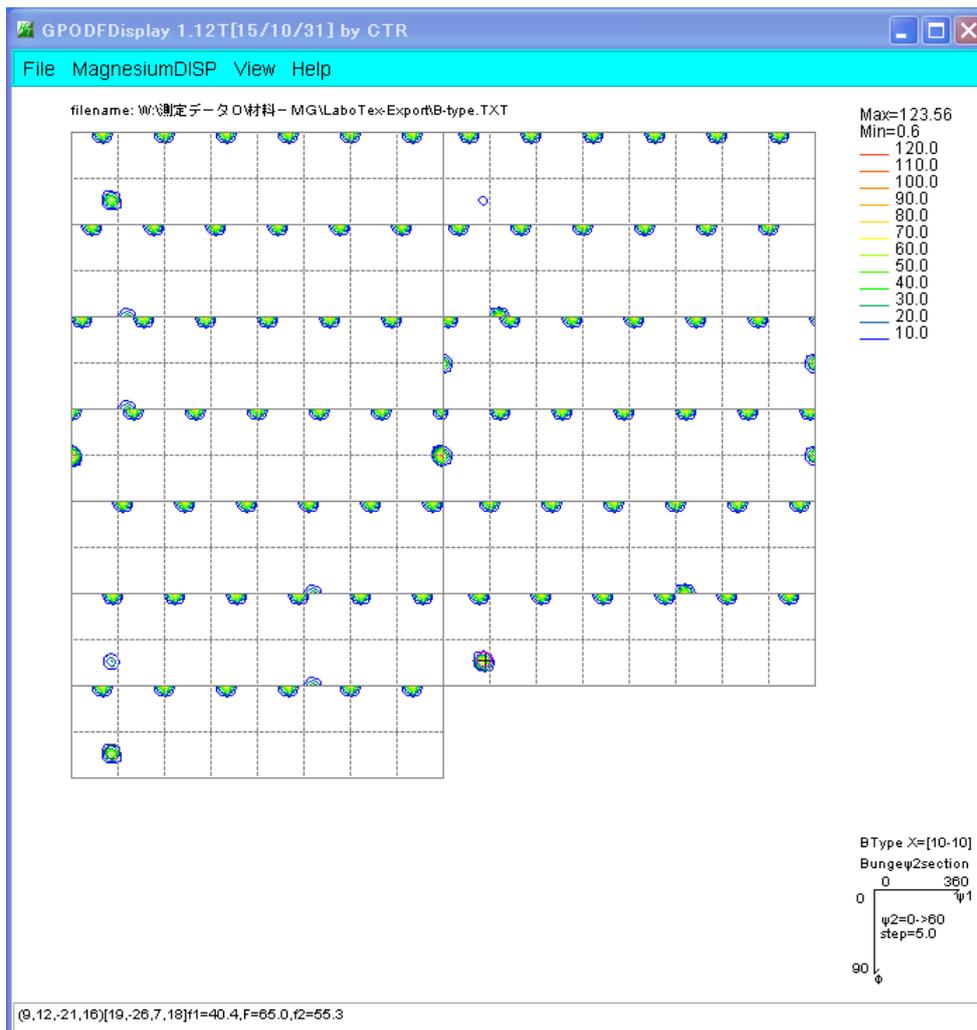
ϕ 2断面 5.5度にて、最大方位密度あたりをマウス右クリック



CrystalOrientationにて (40, 65, 55) を入力し

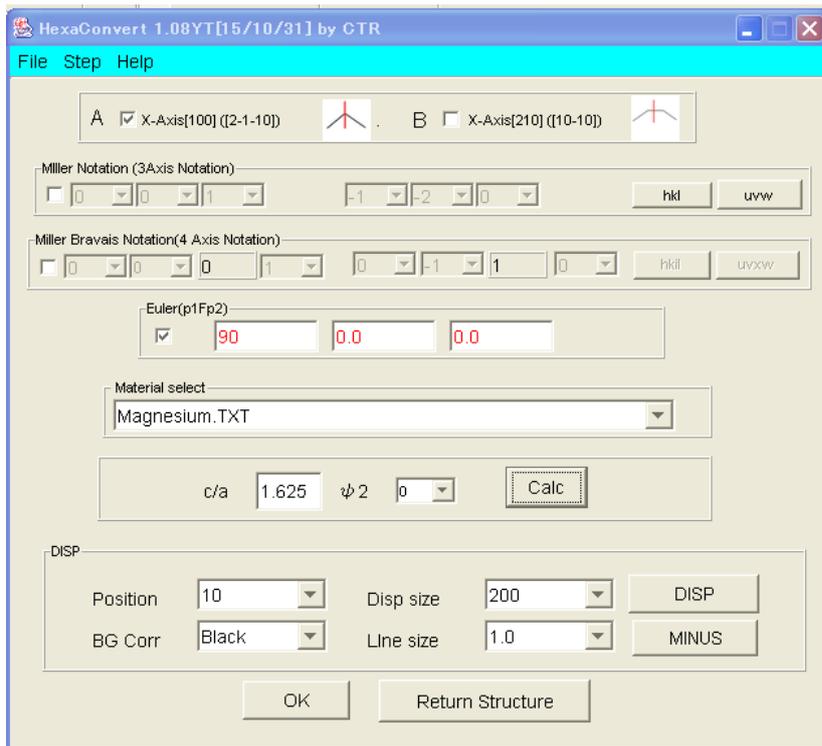
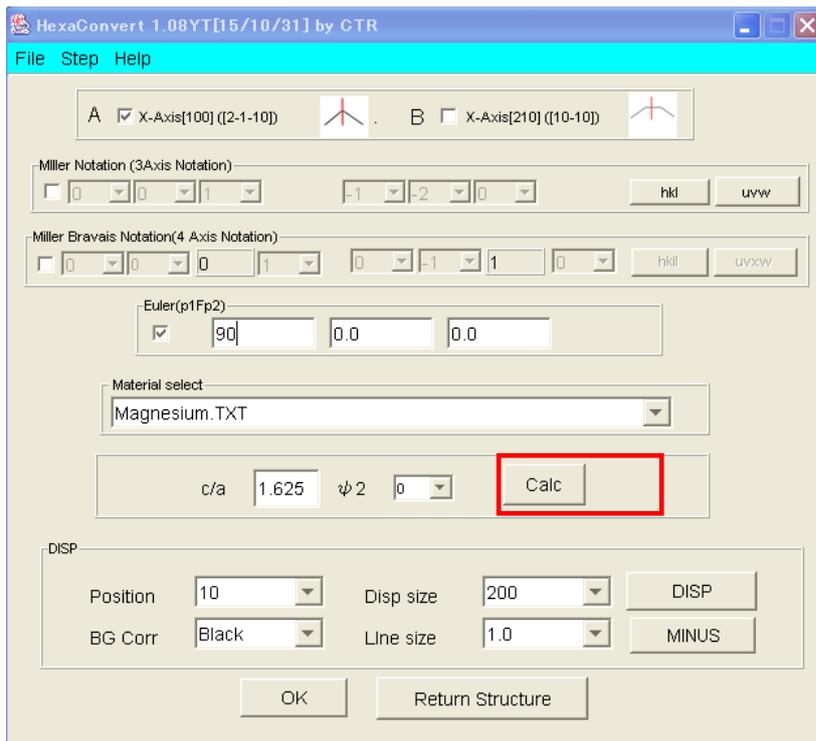


{h k l} <u v w>を決定して、Disp、Returnにて

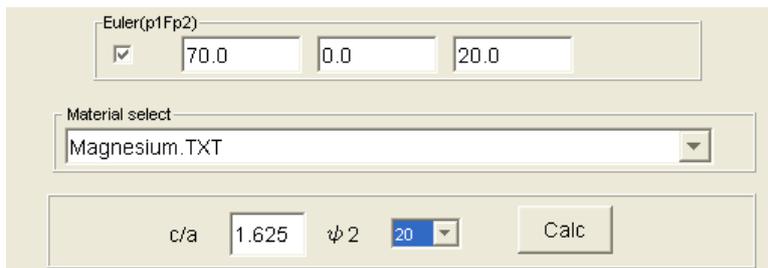


結晶方位と方位位置を描画します。

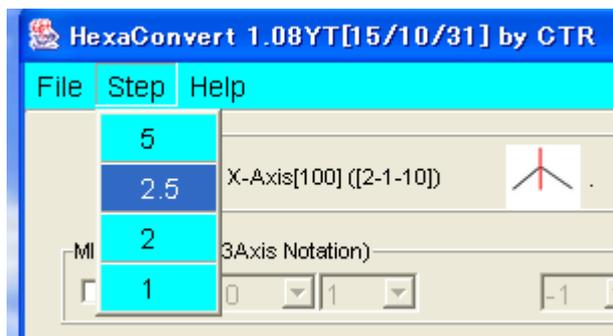
4. (001)[uv0] ($\Phi=0.0$) の場合、 $\phi 1 + \phi 2$ が計算され、単独に $\phi 1$ 、 $\phi 2$ は計算されません。
計算すると、Euler 角度が赤色に変わります。



Fai 2 部分を適当に選択してください。 psi=20 を選択



5. ODF図のステップ間隔が5.0以外の場合



選択すると、fai のデータが変更されます。