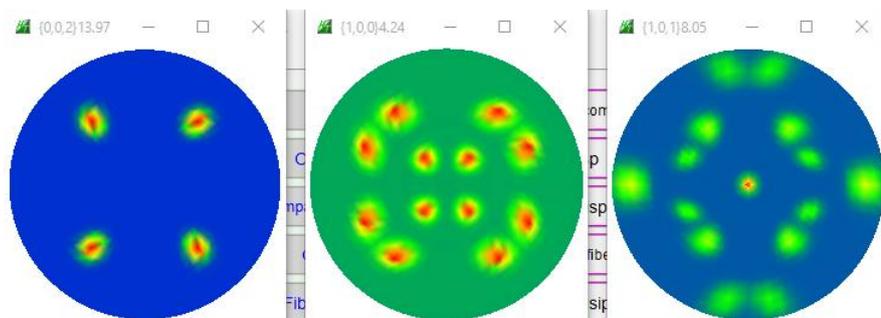
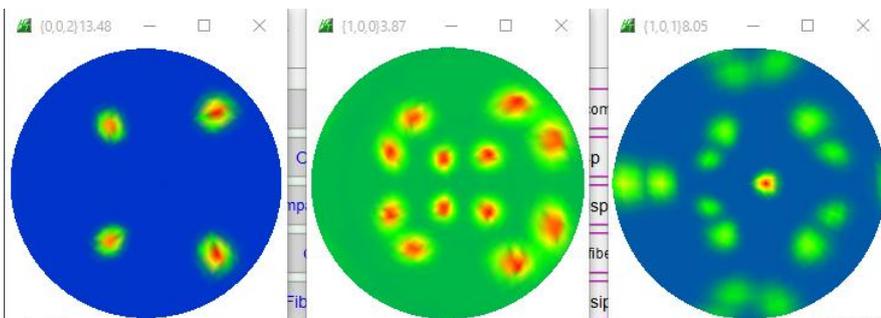


六方晶，非対称極点図ODF解析の注意点

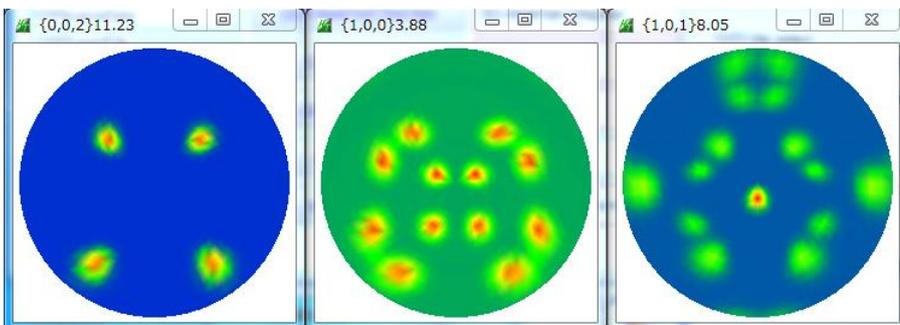
対称極点図



非対称極点図（極点データの回転方向に依存する）



非対称極点図（極点データの回転方向に依存しない）



2015年12月02日

HelperTex Office

目次

1. 概要
2. 3指数 \leftrightarrow 4指数変換
3. 3指数 \leftrightarrow 4指数変換とX軸の関係をHexaConvertソフトウェアで確認
4. LaboTexとTexToolsで対称極点図を非対称ODF解析
 - 4.1 LaboTex (A-TypeでExport) 解析
 - 4.2 TexTools (A-Typeで読み込み) 解析
 - 4.3 LaboTex (B-TypeでExport) 解析
 - 4.4 TexTools (B-Typeで読み込み) 解析
5. LaboTexとTexToolsで非対称極点図を非対称ODF解析
 - 5.1 正規入力極点図
 - 5.1.1 LaboTex (A-Type, データ回転をCW)
 - 5.1.2 TexTools (A-Type, データ回転をCCW)
 - 5.1.3 LaboTex (B-Type, データ回転をCW)
 - 5.1.4 TexTools (B-Type, データ回転をCCW)
 - 5.2 逆転入力極点図
 - 5.2.1 LaboTex (A-Type, データ回転をCCW)
 - 5.2.2 TexTools (A-Type, データ回転をCW)
 - 5.2.3 LaboTex (B-Type, データ回転をCCW)
 - 5.2.4 TexTools (B-Type, データ回転をCW)
6. GPODFDisplayの4指数 \leftrightarrow 3指数切り替え
7. まとめ

使用したソフトウェア

GPODFDisplay Ver. 1.14

HexaConvert Ver. 1.09

最新のソフトウェアをHelperTexサイトからdownloadして下さい。

2015/12/05

1. 概要

六方晶では、結晶方位を表現する方法が複雑である。

3 指数 \leftarrow 4 指数の表現方法

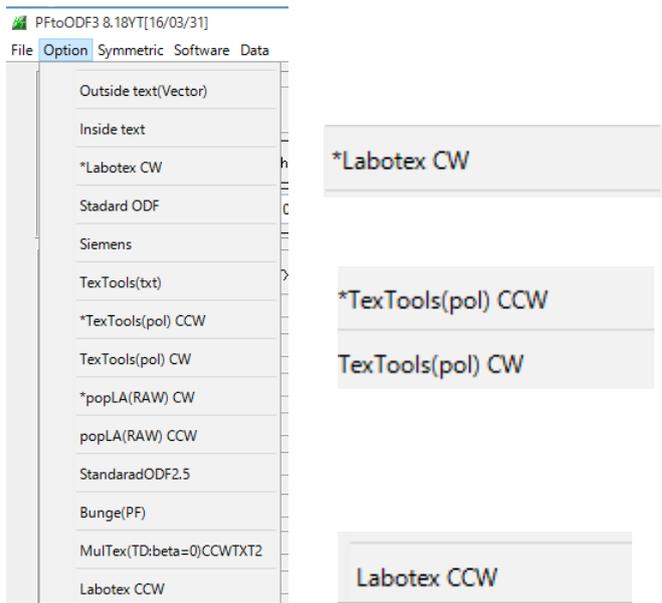
結晶座標系の X 軸を $[2 \cdot 1 \cdot 1 0]$ (A-Type) \leftarrow $[1 0 \cdot 1 0]$ (B-Type)

極点図データの回転方向 CW \leftarrow CCW

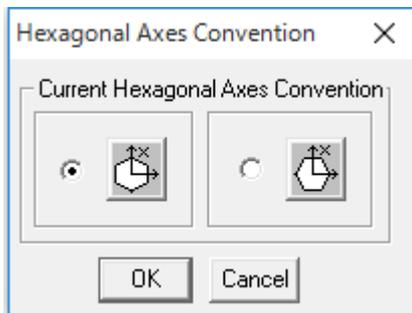
3 指数 \leftarrow 4 指数は、ODF 図には関係ないが、X 軸の取り方とデータの回転方向は ODF 図に
関係する。

市販されている六方晶の ODF 解析では、L a b o T e x と T e x T o o l s が知られているが、
L a b o T e x では、3 指数表現、X 軸は $[2 \cdot 1 \cdot 1 0]$ と $[1 0 \cdot 1 0]$ 、データ回転方向は CW
T e x T o o l s は、3 指数表現、X 軸は $[2 \cdot 1 \cdot 1 0]$ 、データ回転方向は CCW である。
共通の ODF 図の表示は以下の方法で行えます。

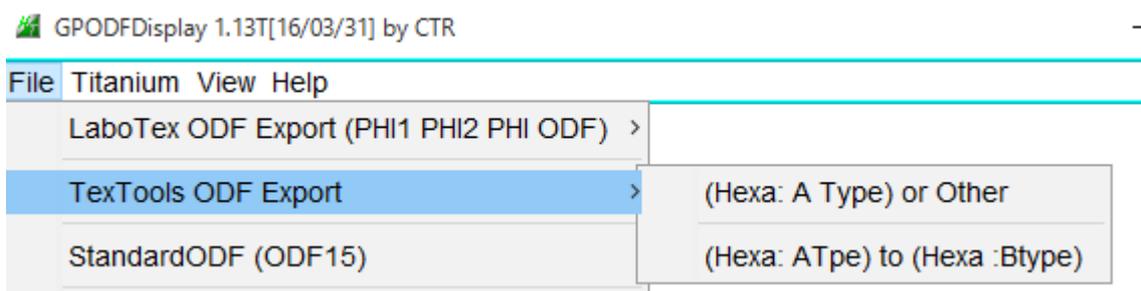
データの回転方向の切り替えは、P F t o O D F 3 で行える。



X 軸の切り替えは、L a b o T e x では ODF 内部で切り替えられる。



T e x T o o l s では G P O D F D i s p l a y の読み込み時に切り替える。



2. 3 指数 $\langle - \rangle$ 4 指数変換

Direction $\langle uvw \rangle$ to $\langle UVTW \rangle$

$$U=(2u-v)/3$$

$$V=(2v-u)/3$$

$$T=-(u+v)/3$$

$$W=w$$

for example:

$\langle 100 \rangle$ is equal $\langle 2-1-10 \rangle$.

$\langle 210 \rangle$ is equal $\langle 10-10 \rangle$

Plane $\{uvw\}$ to $\{UVTW\}$:

$$U=u$$

$$V=v$$

$$T=-(u+v)$$

$$w=W$$

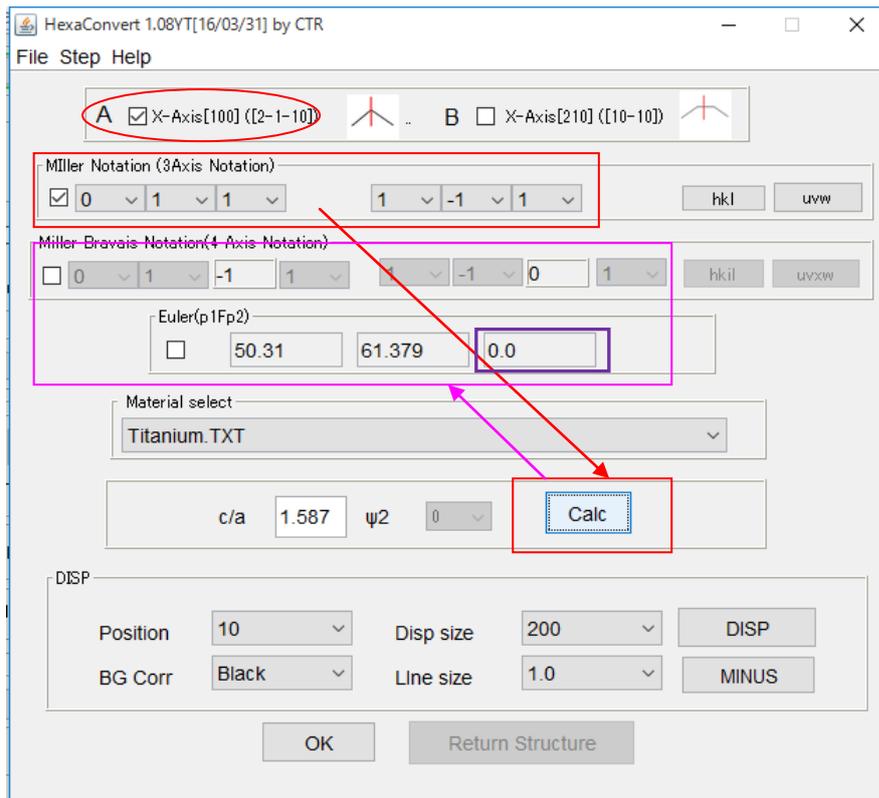
for example:

$\{2-10\}$ is equal $\{2-1-10\}$;

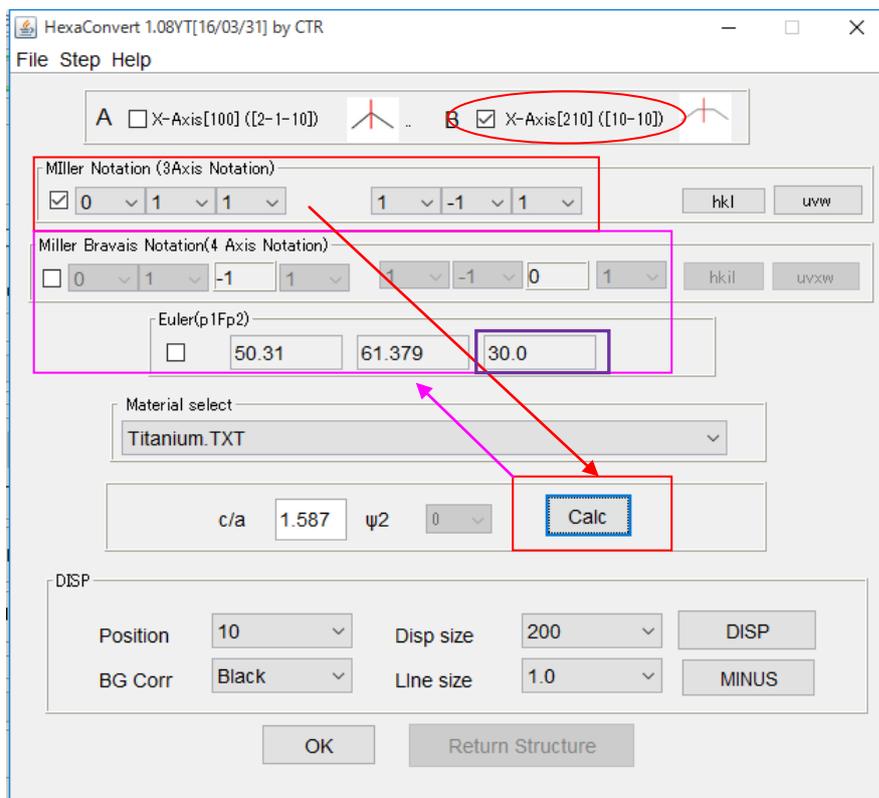
$\{10-10\}$ is equal $\{100\}$.

ODF 図から 4 指数結晶方位は、GPODF Display から得られます

3. 3指数 \leftrightarrow 4指数変換とX軸の関係をHexaConvertソフトウェアで確認
X軸が $[2\ -1\ -1\ 0]$ の場合 (A-Type)



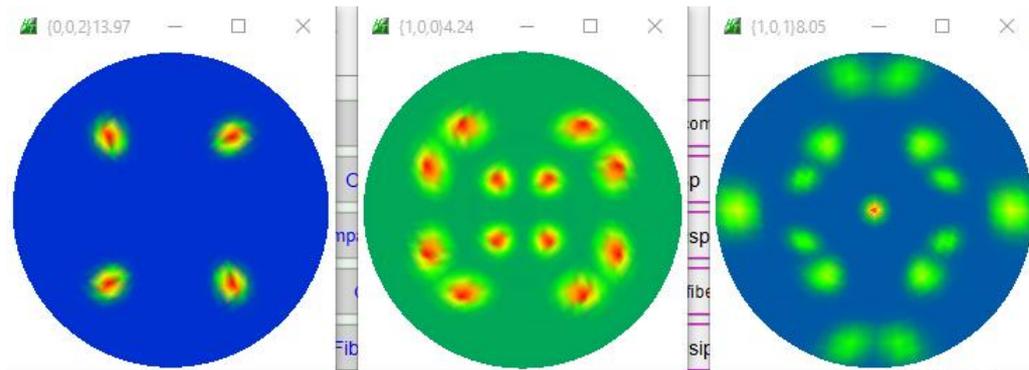
X軸が $[1\ 0\ -1\ 0]$ の場合 (B-Type)



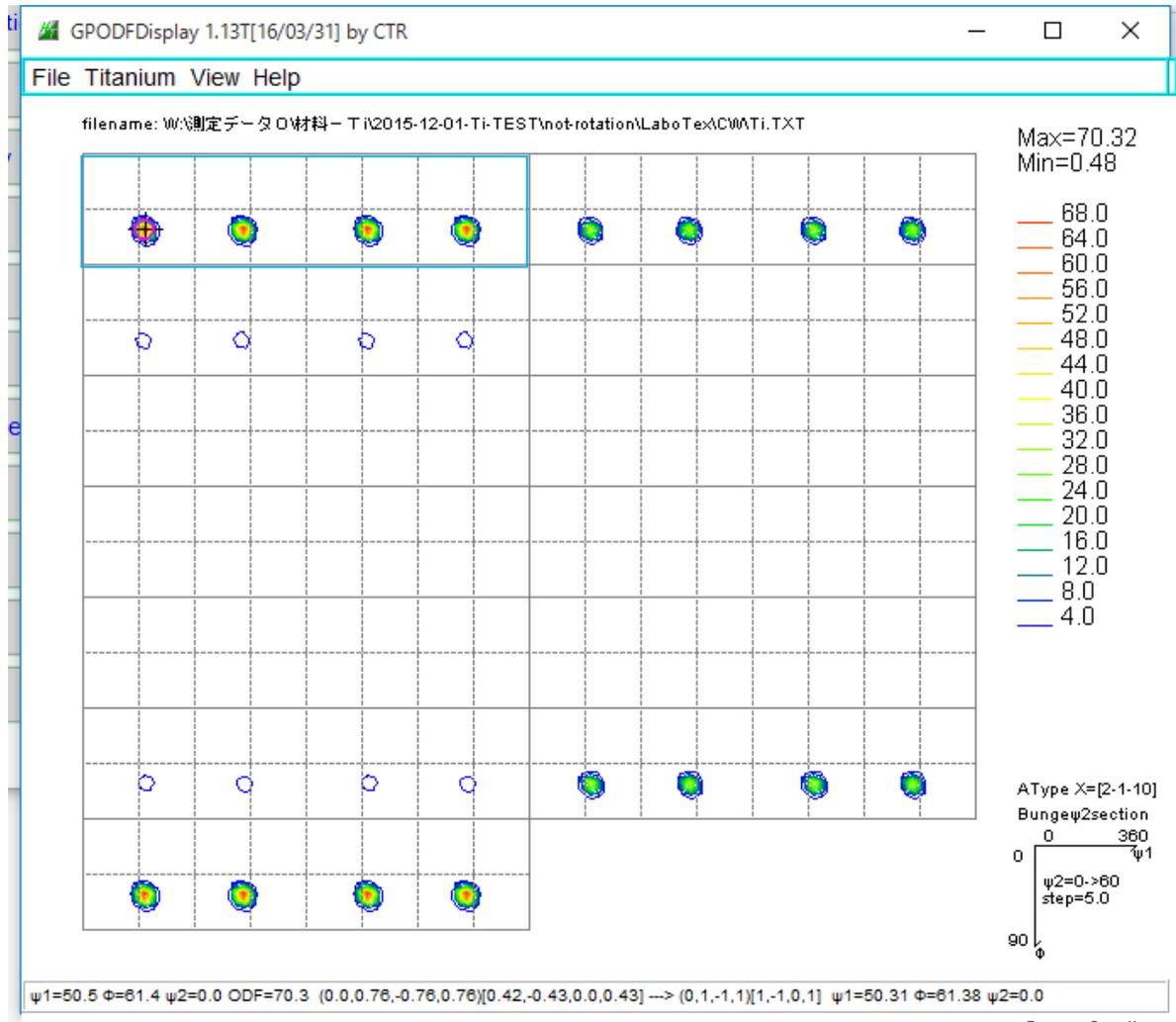
Euler角度 ϕ_2 が30度異なります。

4. LaboTexとTexToolsで対称極点図を非対称ODF解析

対称極点図を各ODFで解析を行い、ODFをExportし、GPODFDisplayで確認
 入力極点図



4. 1 LaboTex (A-TypeでExport) 解析



AType X=[2-1-10]

Bungeψ2section

0 360
ψ1

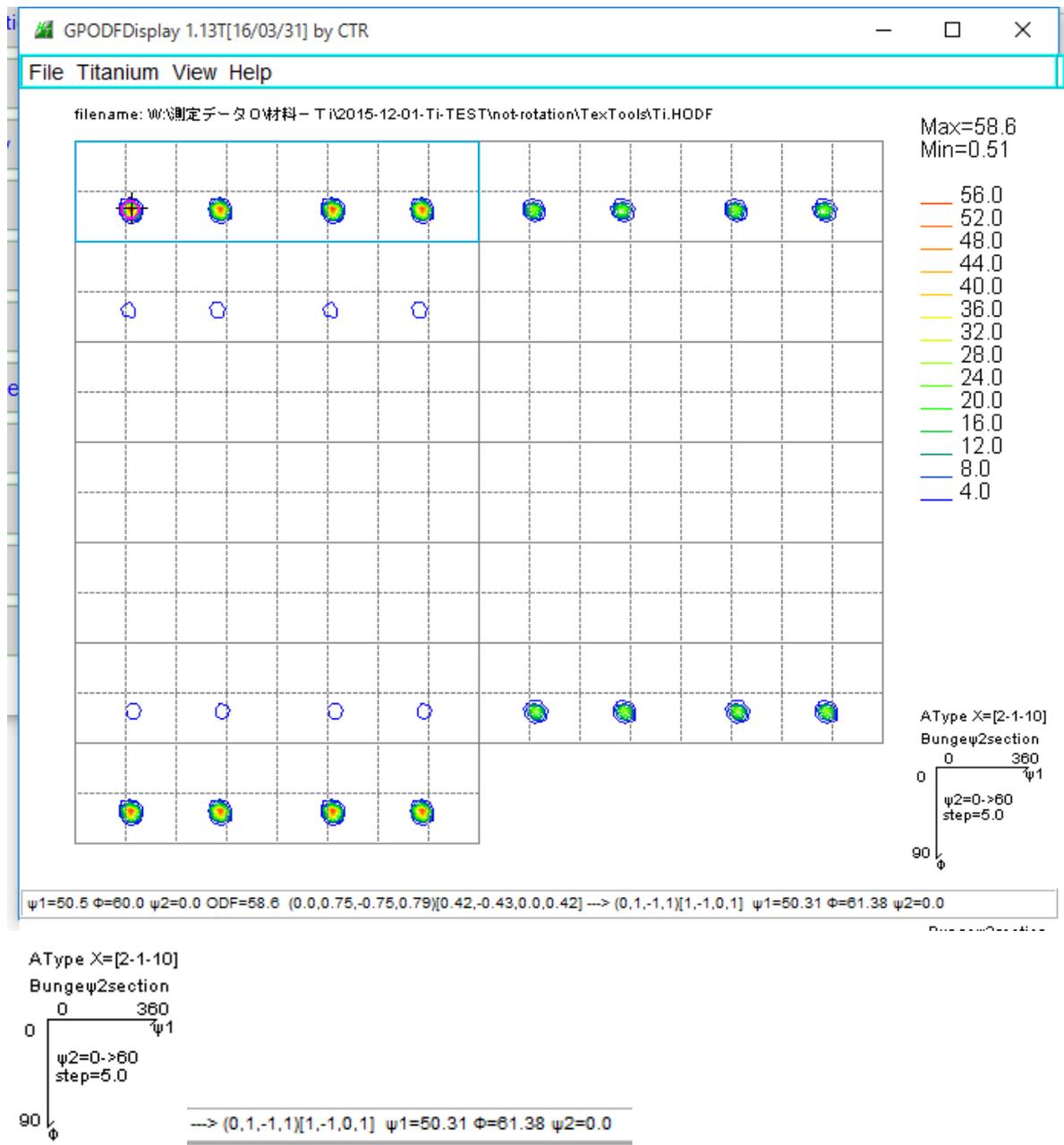
0 90
ψ

ψ2=0->60

step=5.0

---> (0,1,-1,1)[1,-1,0,1] ψ1=50.31 Φ=61.38 ψ2=0.0

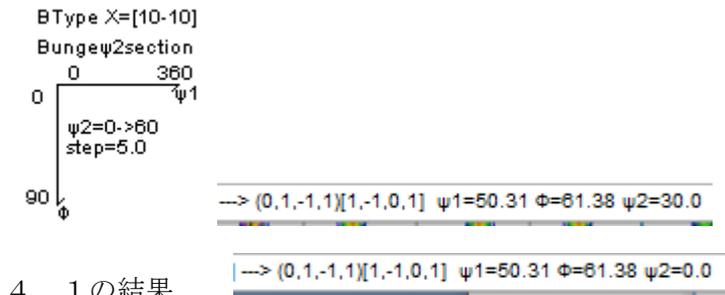
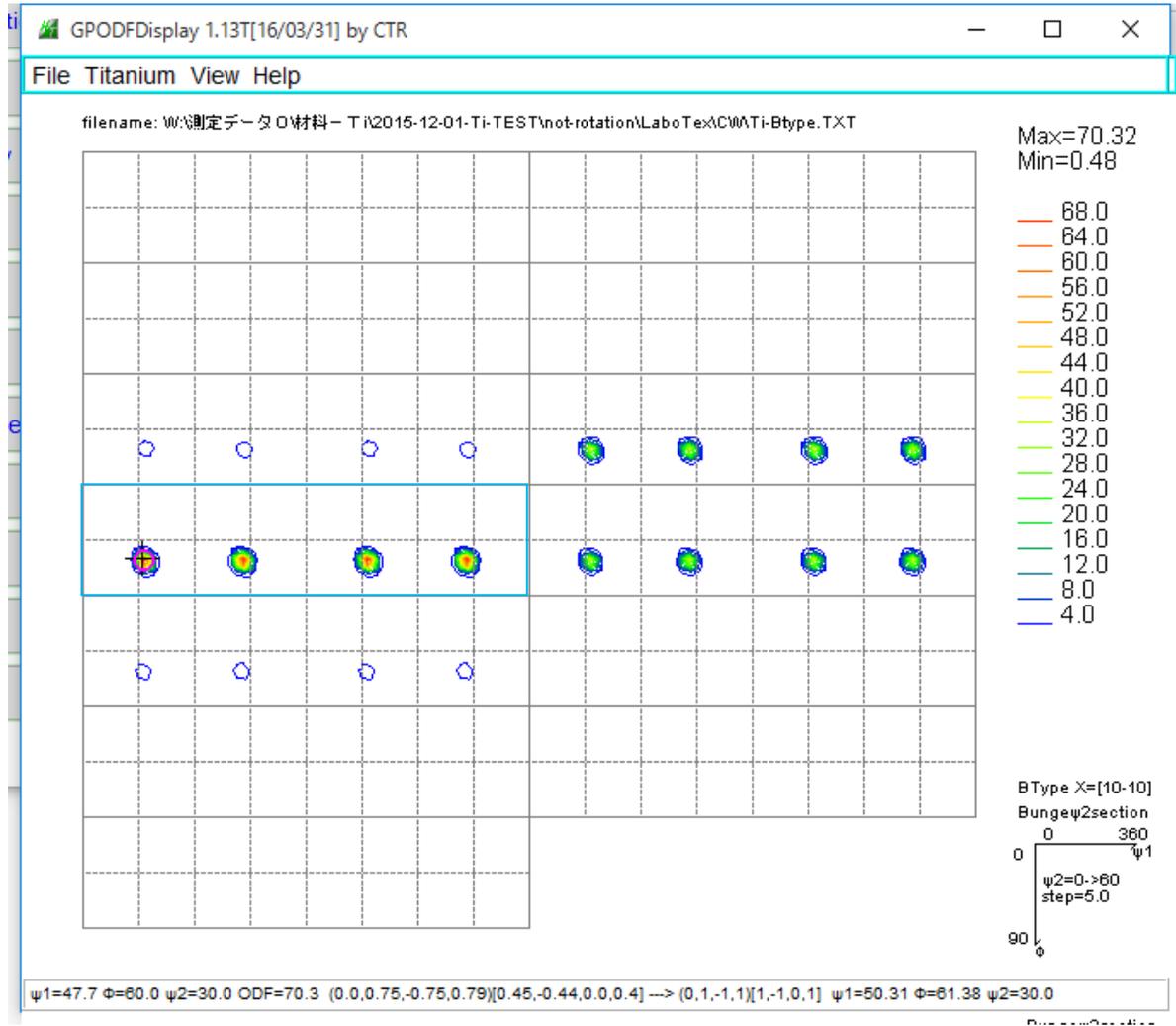
4. 2 TexTools (A-Typeで読み込み) 解析



4. 1と4. 2から、極点図データの回転方向が異なっても、対称極点図なら計算される結晶方位は同一である。

4. 3 LaboTex (B-TypeでExport) 解析

LaboTexでB-Type解析結果のExportデータを読み込む

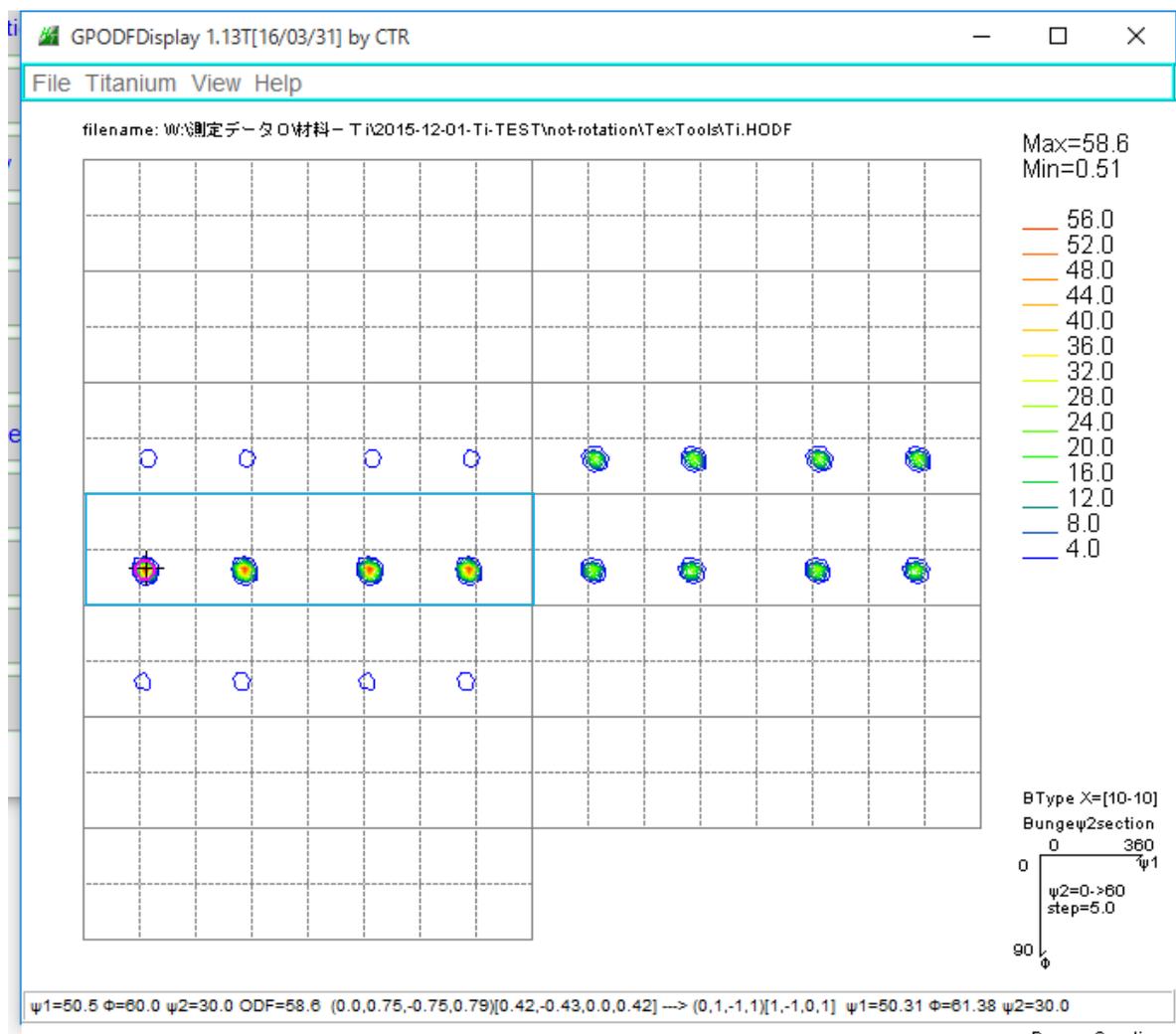


4. 1の結果

4. 1解析結果からEuler角度φ2が30度異なる。

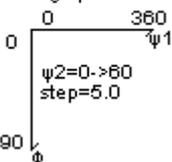
4. 4 TexTools (B-Typeで読み込み) 解析

TexToolsはA-Typeしか解析出来ないので、読み込み時B-Typeに変換する



BType X=[10-10]

Bungeψ2section



---> (0,1,-1,1)[1,-1,0,1] ψ1=50.31 Φ=81.38 ψ2=30.0

---> (0,1,-1,1)[1,-1,0,1] ψ1=50.31 Φ=81.38 ψ2=0.0

4. 2の結果

4. 3, 4. 4から、極点図データの回転方向が異なっても、対称極点図なら計算される結晶方位は同一である。

4. 1, 4. 2, 4. 3, 4. 4からA-TypeとB-TypeではEuler角度φ2が30度異なります。

5. LaboTexとTexToolsで非対称極点図を非対称ODF解析

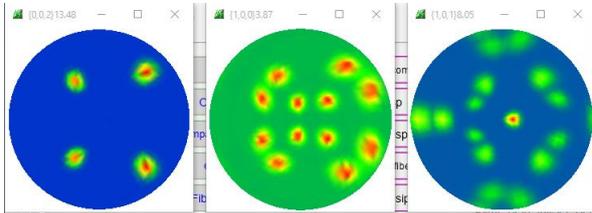
LaboTexの極点図データ回転方向はCWで内部計算が行われている。

TexToolsの極点図データ回転方向はCCWで内部計算が行われている。

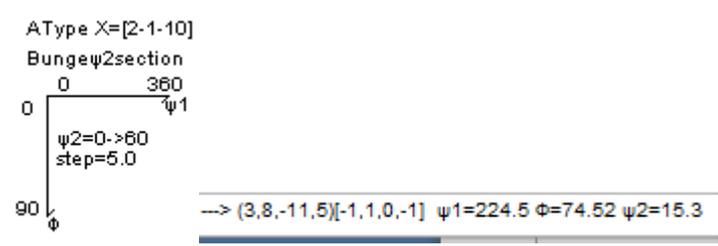
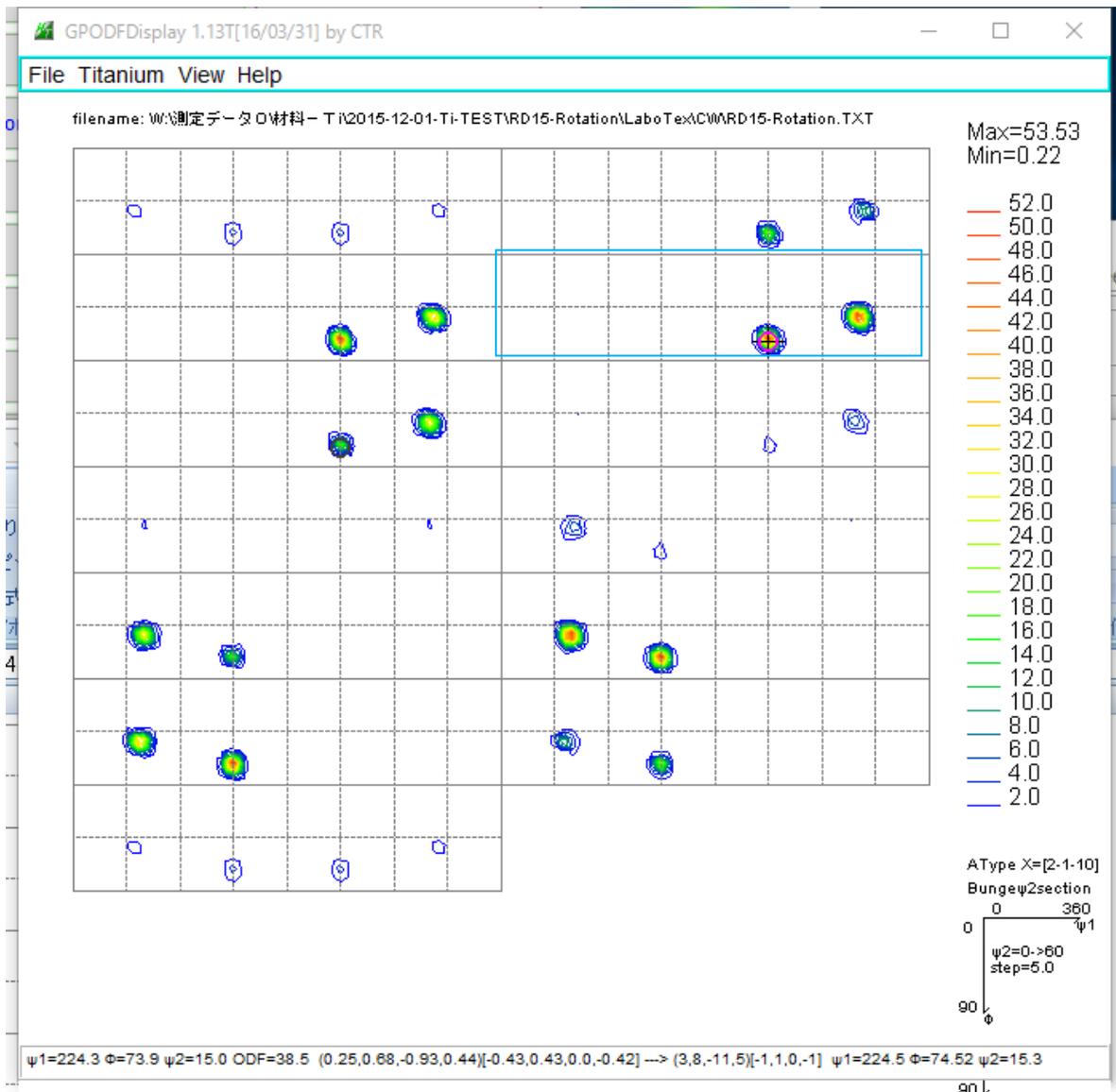
非対称極点図の場合、同一の極点図では、ODF図が異なる。

入力極点図（対称極点図をRD軸に対し、15度の回転処理を行う）

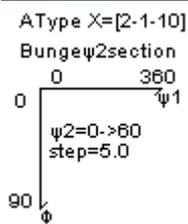
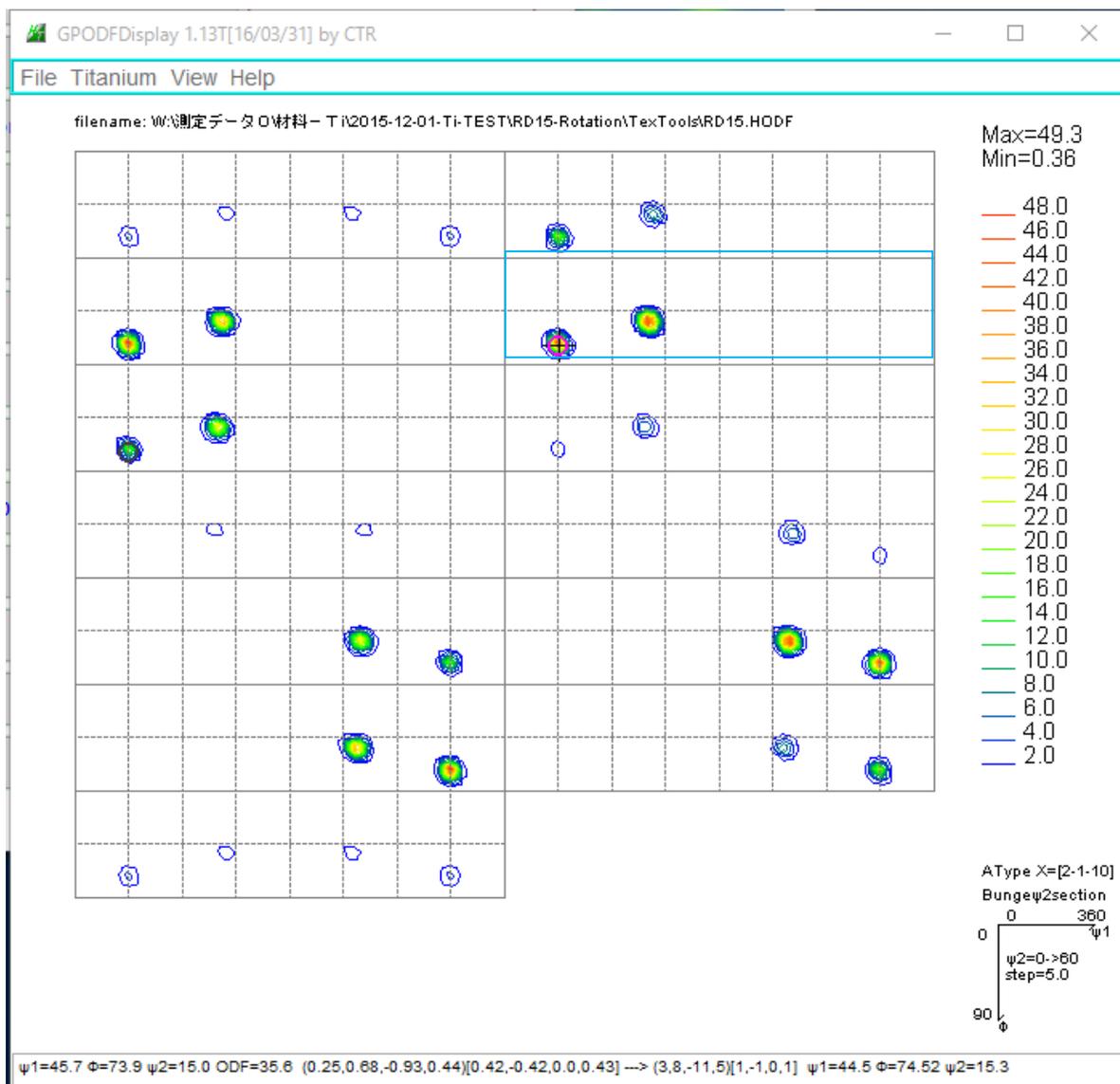
5. 1 正規入力極点図



5. 1. 1 LaboTex (A-Type, データ回転をCW)



5. 1. 2 TexTools (A-Type, データ回転をCCW)



--> (3.8,-11.5)[1,-1,0,1] ψ1=44.5 Φ=74.52 ψ2=15.3

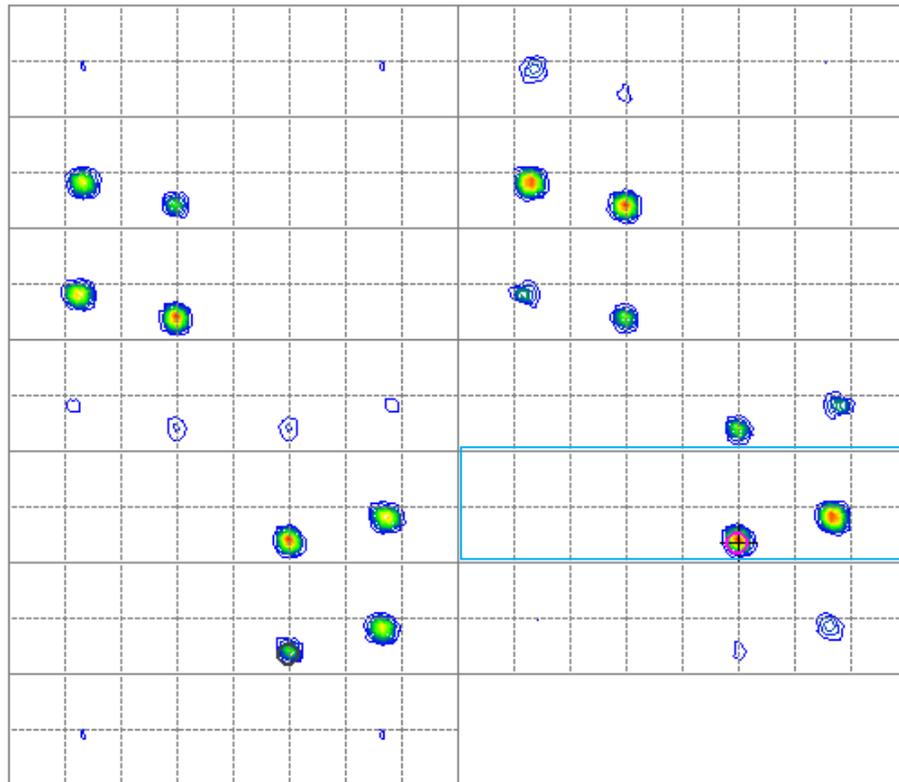
5. 1. 3 LaboTex (B-Type, データ回転をCW)

GPODFDisplay 1.13T[16/03/31] by CTR

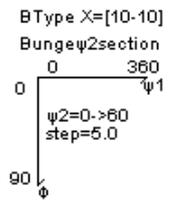
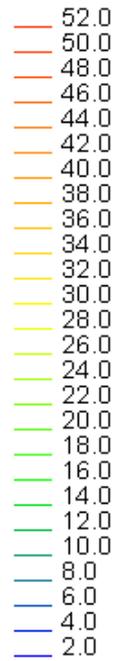
— □ ×

File Titanium View Help

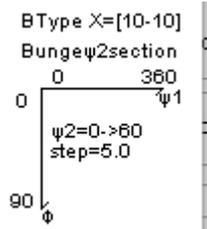
filename: W:\測定データ\材料-Ti\2015-12-01-Ti-TEST\RD15-Rotation\LaboTex\CWARD15-CW-B.TXT



Max=53.53
Min=0.22



(3.8,-11.5)[-1,1,0,-1]f1=224.5,F=74.5,f2=45.3

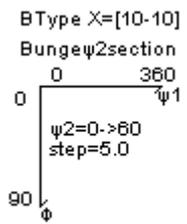
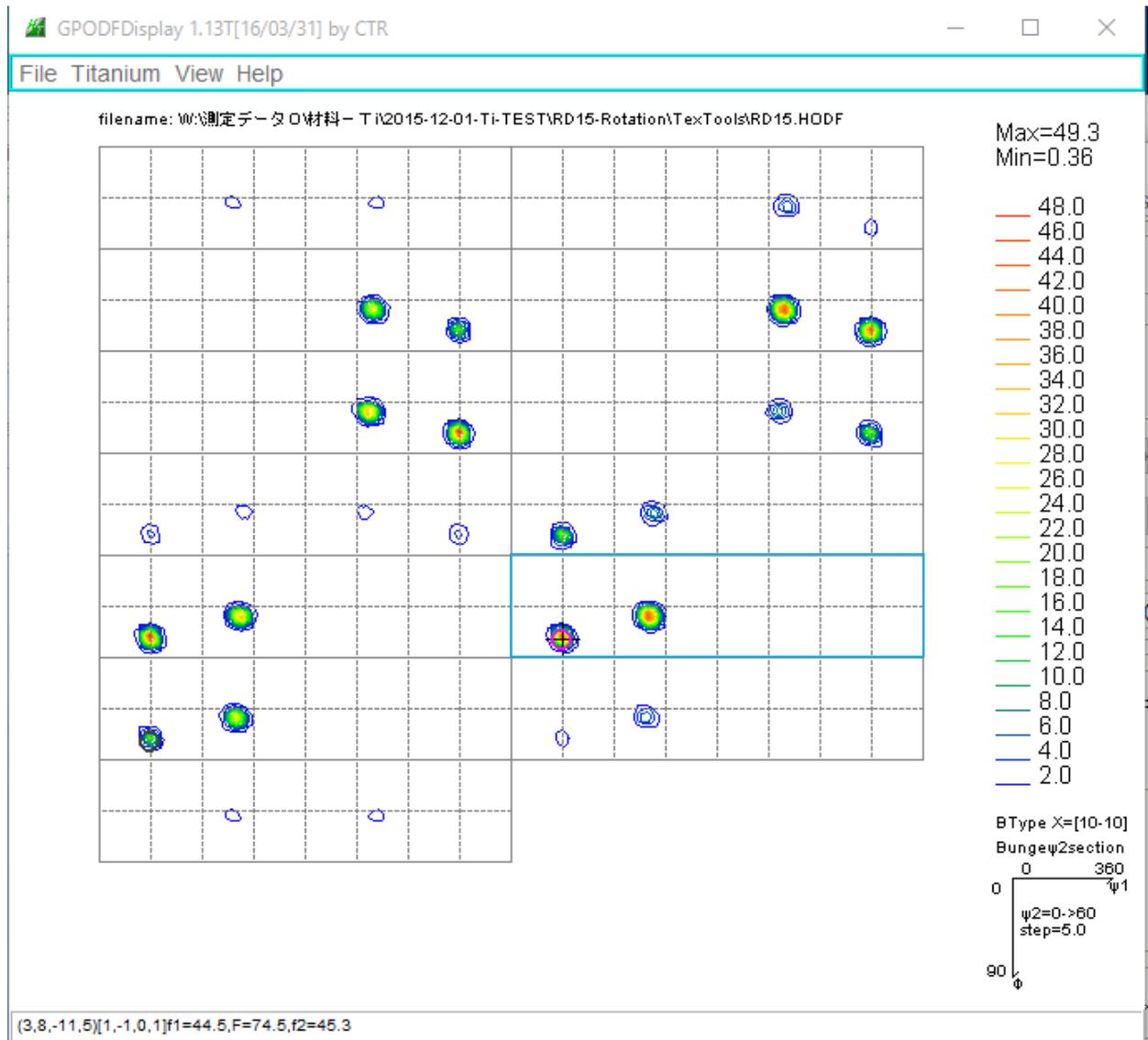


(3.8,-11.5)[-1,1,0,-1]f1=224.5,F=74.5,f2=45.3

--> (3.8,-11.5)[-1,1,0,-1] ψ1=224.5 Φ=74.52 ψ2=15.3

5. 1. 1 の結果

5. 1. 4 TexTools (B-Type, データ回転をCCW)



(3.8,-11.5)[1,-1.0,1]f1=44.5,F=74.5,f2=45.3

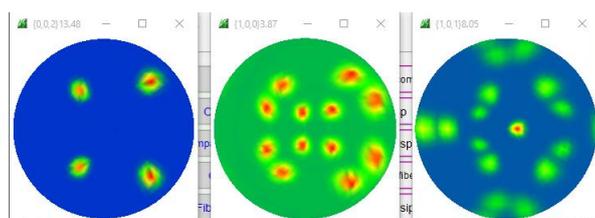
5. 1. 2の結果

→ (3.8,-11.5)[-1,1.0,-1] ψ1=224.5 φ=74.52 ψ2=15.3

5. 2 逆転入力極点図

正規極点図から回転方向を逆にした極点図

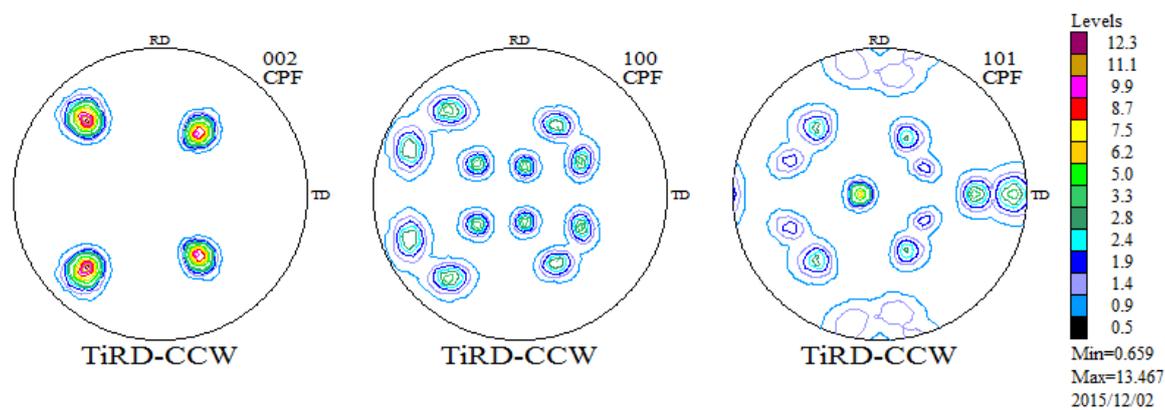
正規極点図



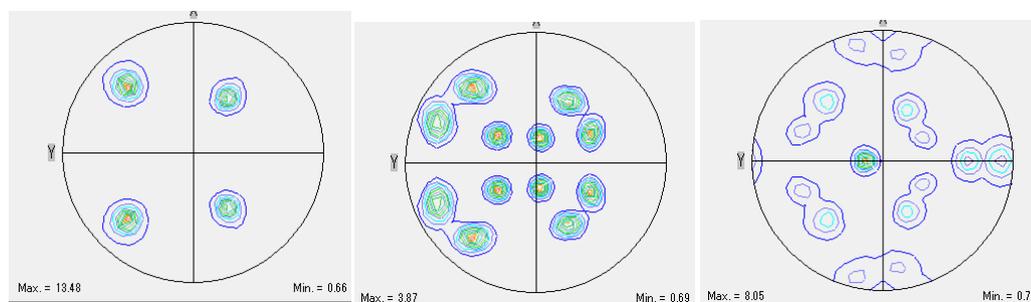
逆転極点図

PF to ODF 3 で作成される。

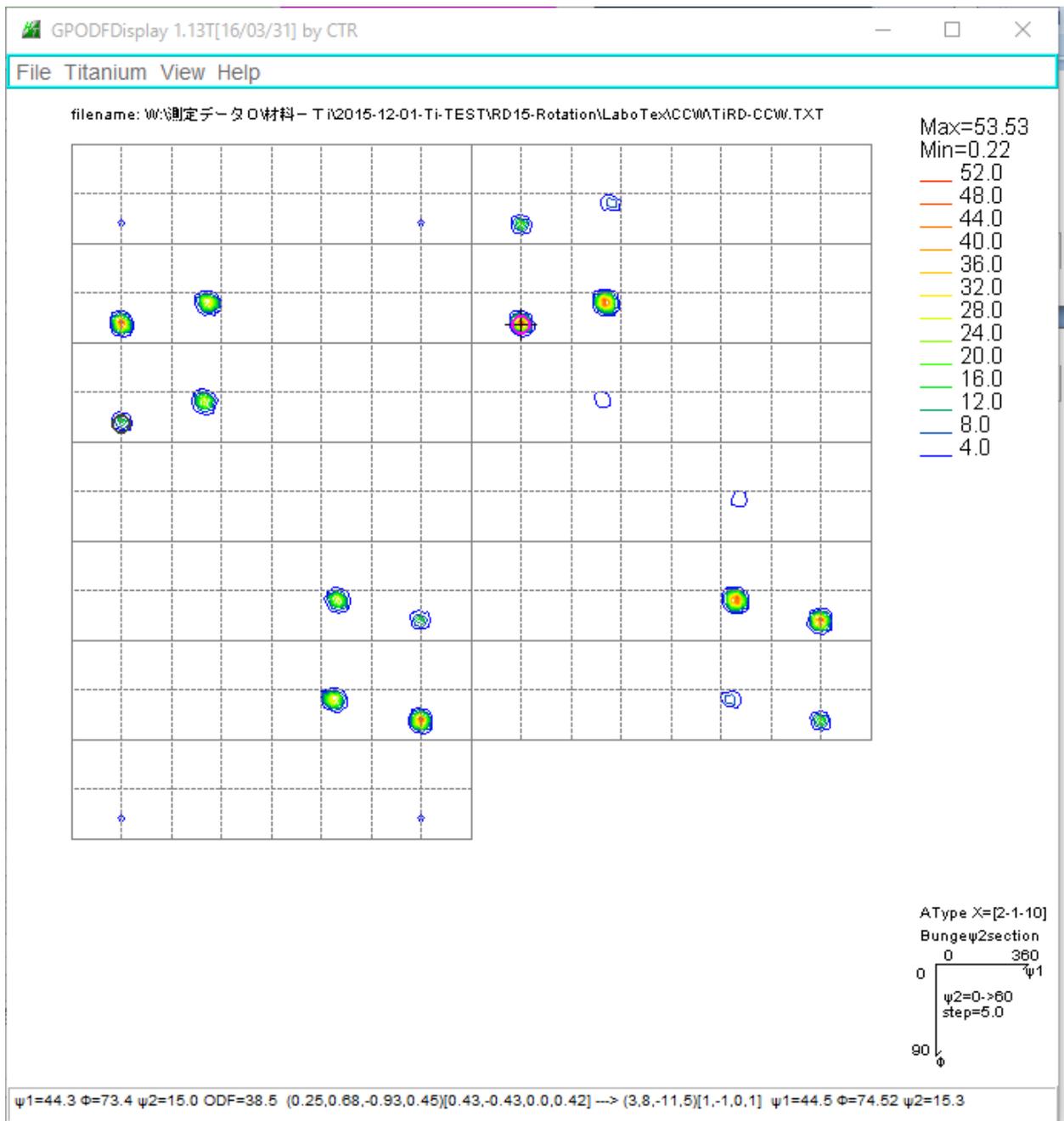
LaboTex 向け (CCW)



TexTools 向け (CW)

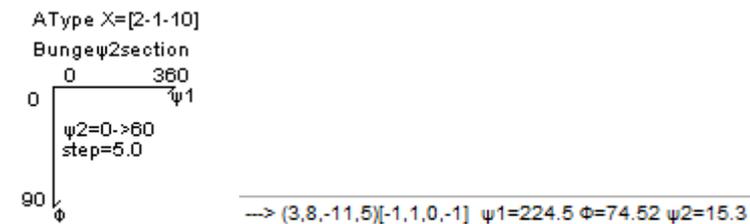
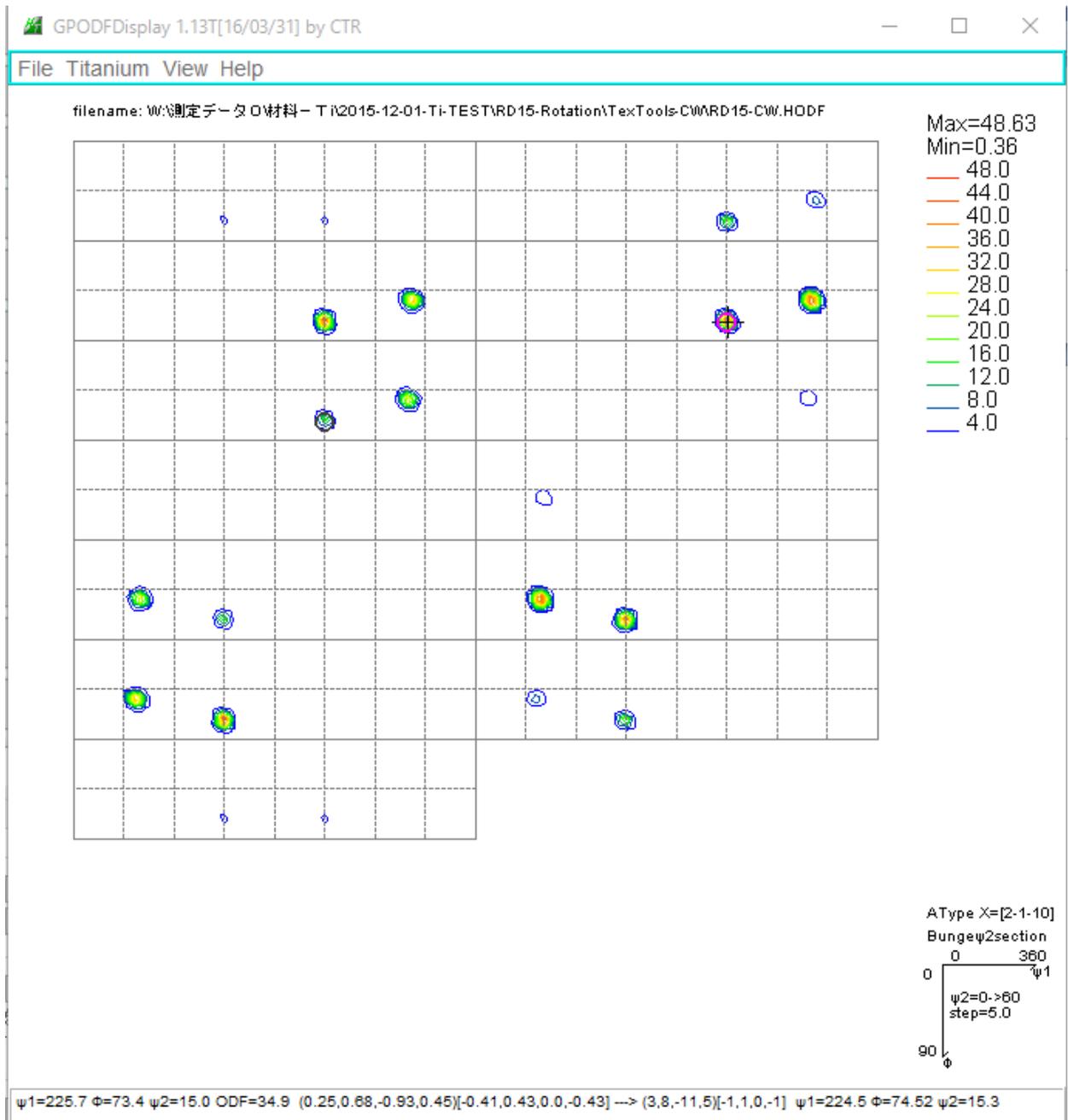


5. 2. 1 LaboTex (A-Type, データ回転をCCW)



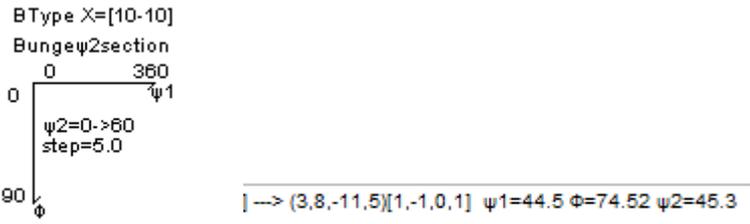
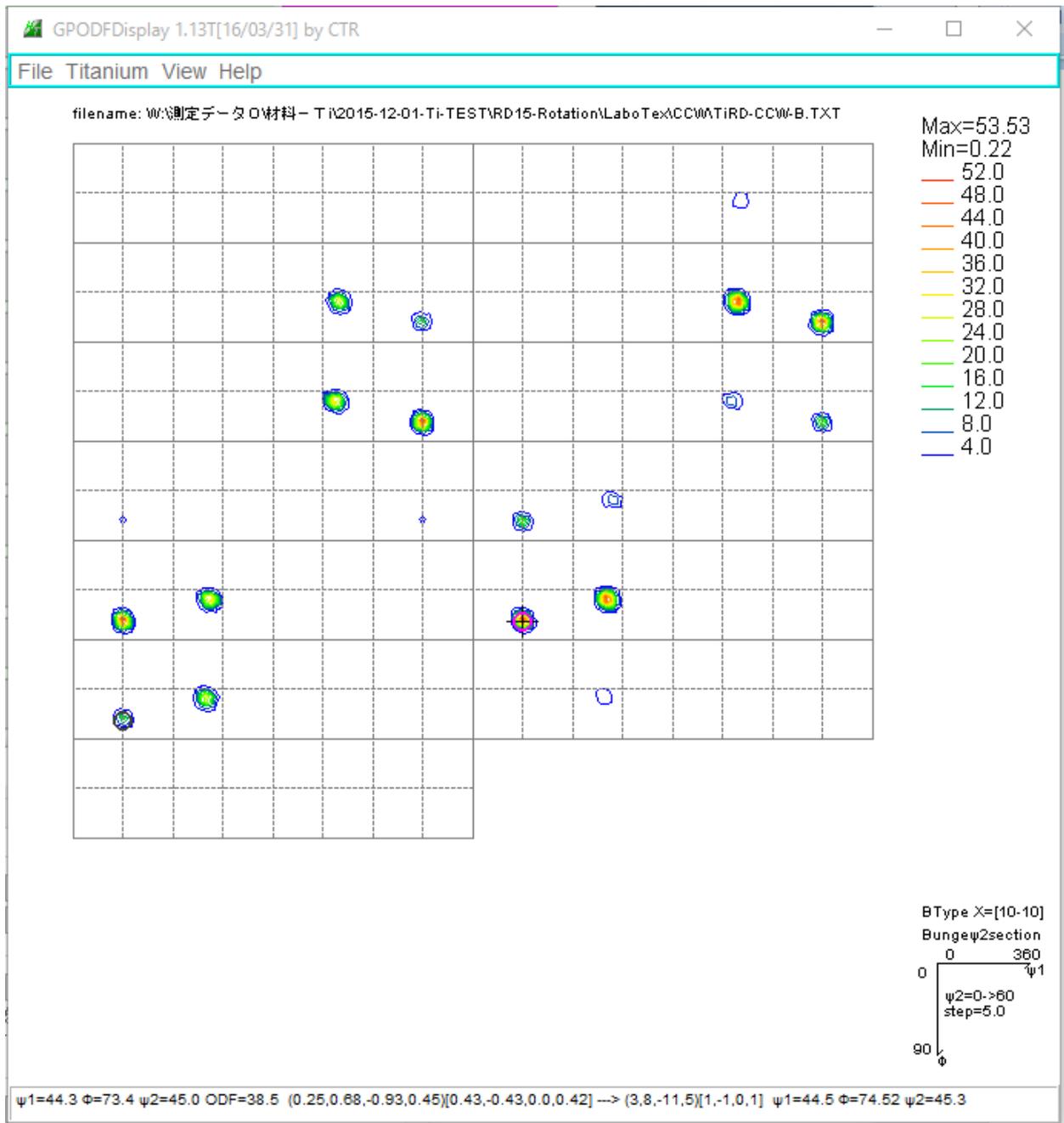
この結果は、5. 1. 2 TexTools (A-Type, データ回転をCCW) と同じ
しかし、入力極点図、再計算極点図は逆回転である。

5. 2. 2 TexTools (A-Type, データ回転をCW)



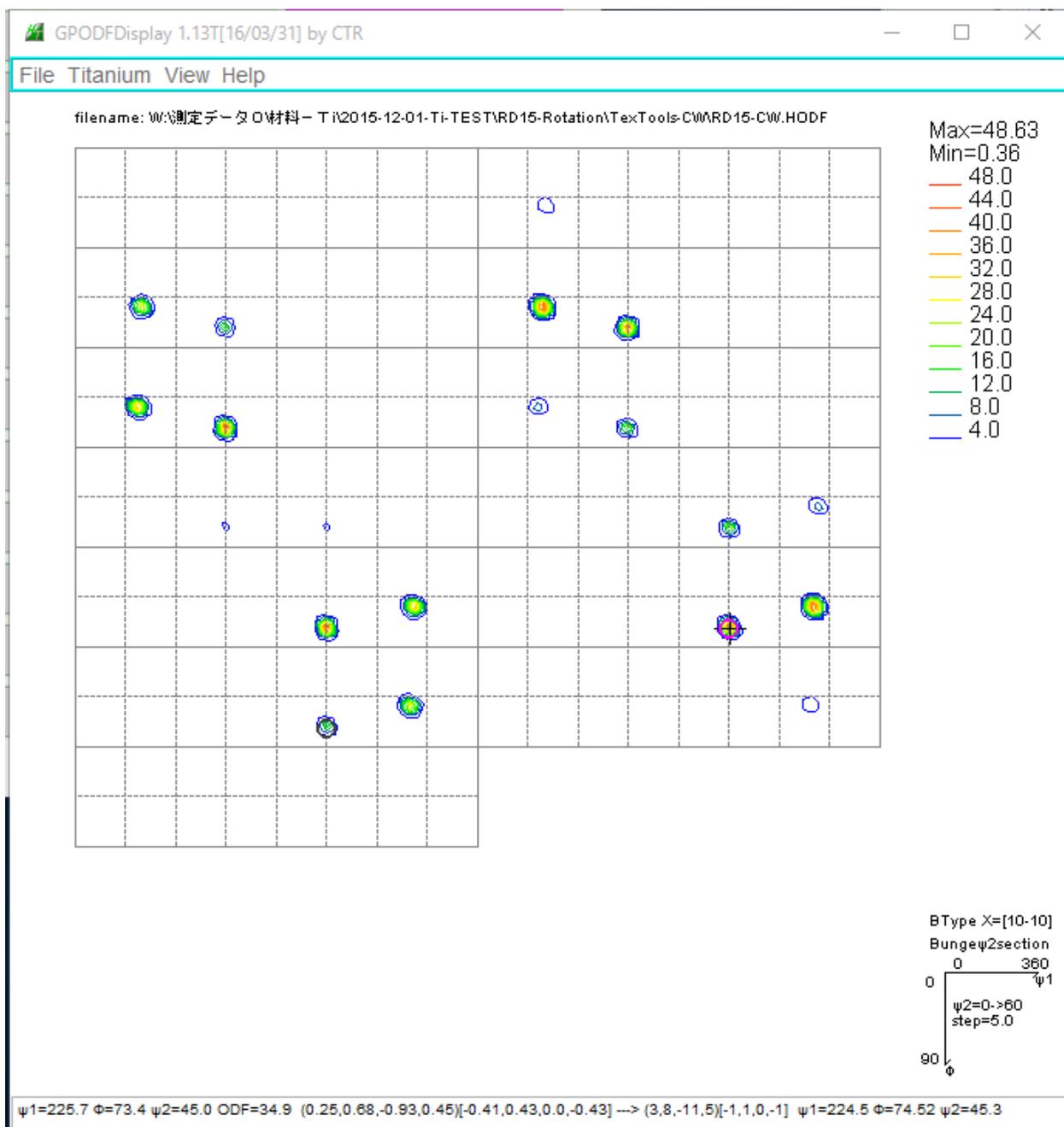
この結果は、5. 1. 1 LaboTex (A-Type, データ回転をCW) と同じ
しかし、入力極点図、再計算極点図は逆回転である。

5. 2. 3 LaboTex (B-Type, データ回転をCCW)



この結果は、5. 1. 4 TexTools (B-Type, データ回転をCCW) に対し、入力極点図、再計算極点図は逆回転である。

5. 2. 4 TexTools (B-Type, データ回転をCW)

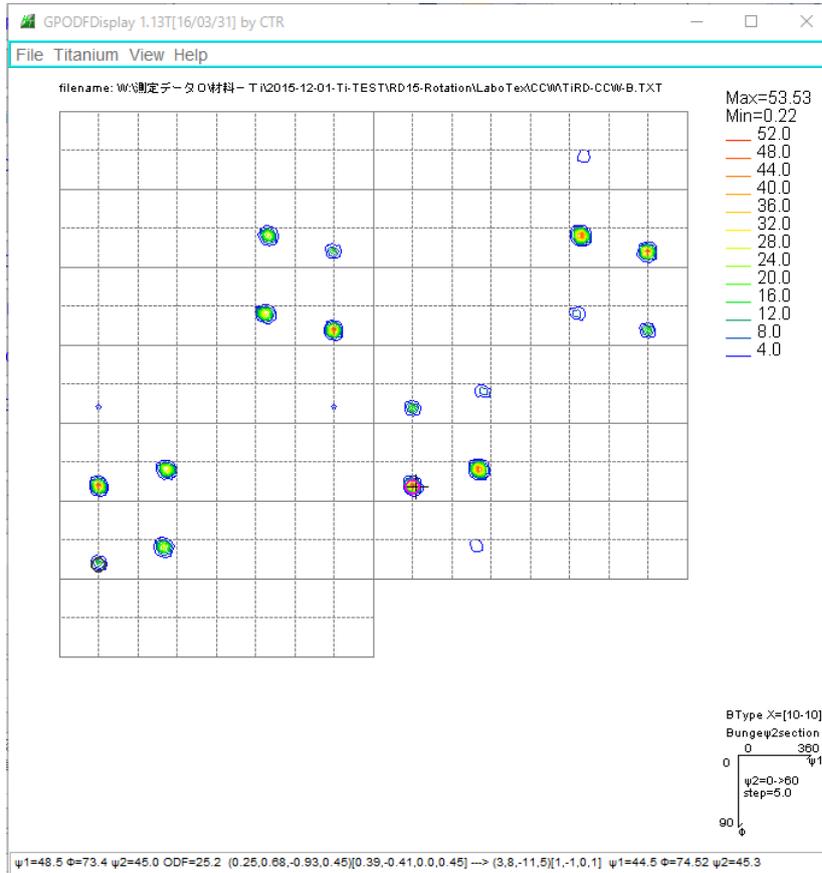


この結果は、LaboTex (B-Type, データ回転をCW)
しかし、入力極点図、再計算極点図は逆回転である。

6. GPODFDisplay の 4 指数 \leftrightarrow 3 指数切り替え

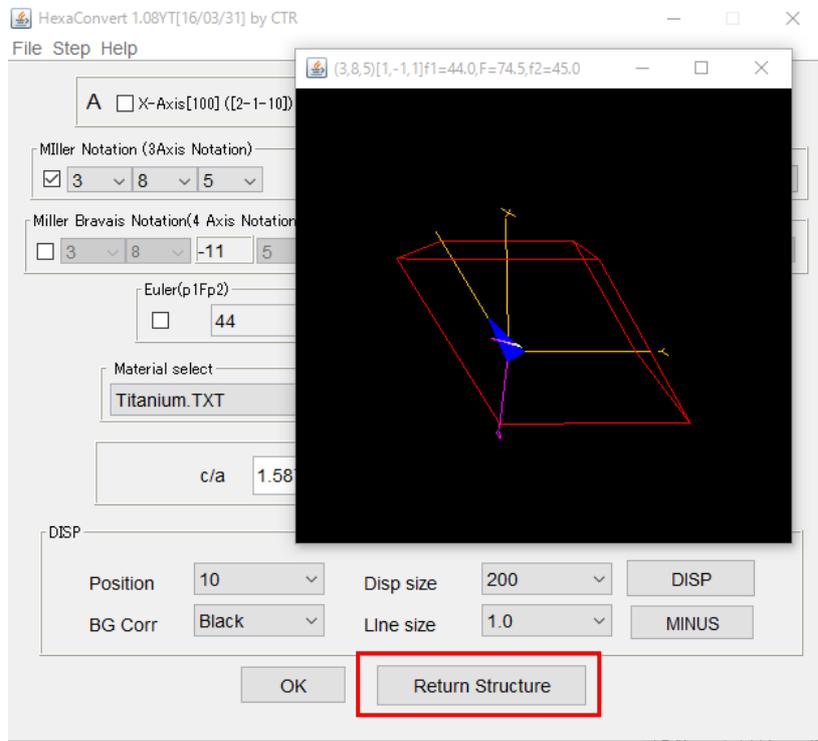
GPODFDisplay は、ODF 図上のマウスクリックでは 4 指数表示を行います、メニューの **CrystalOrientation** では、3 指数表示も可能です。

5. 2. 3 データを用いて説明します。

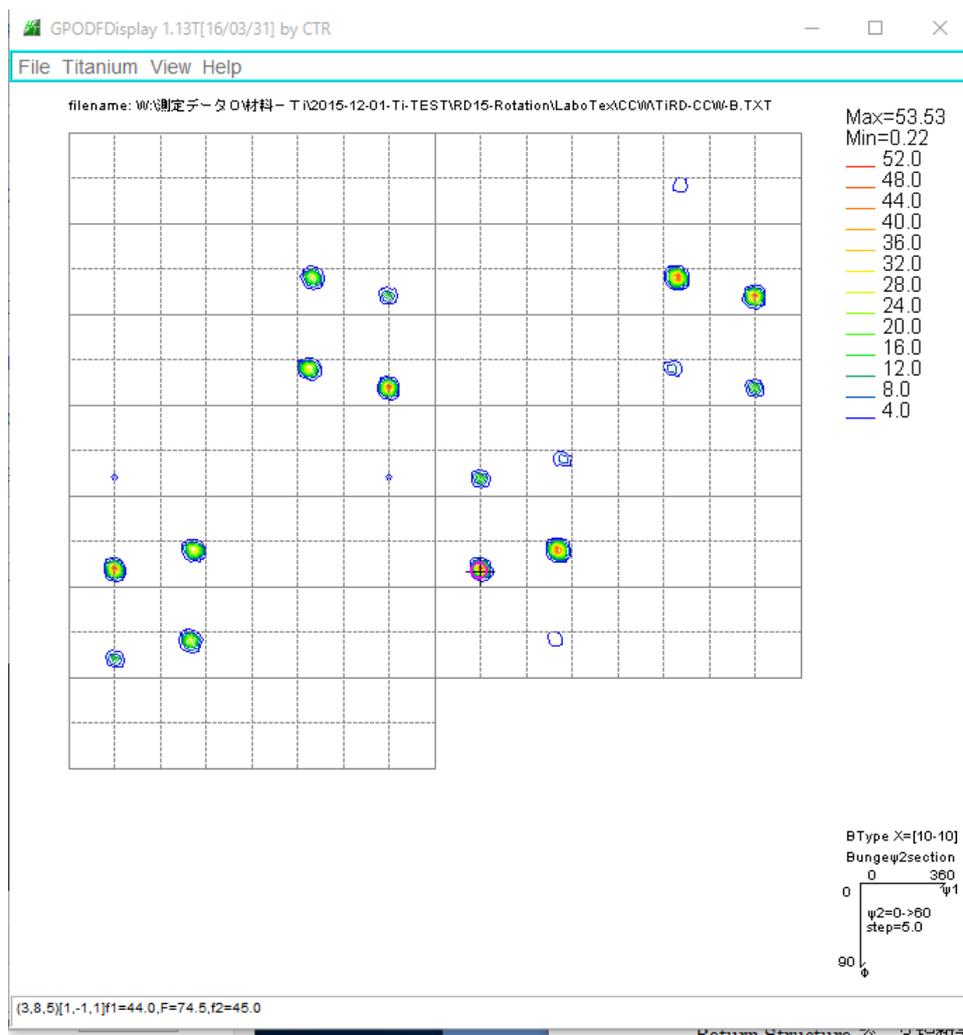


マウスクリックでは 4 指数で表示します。 $\rightarrow (3.8, -11.5)[1, -1, 0, 1] \psi_1=44.5 \Phi=74.52 \psi_2=45.3$

計算されている Euler 角度から指数計算を行い、3 指数を選択して **D i s p**



Return Structure で、3 指数表示を行います。



(3,8,5)[1,-1,1]f1=44.0,F=74.5,f2=45.0

7. まとめ

L a b o T e x と T e x T o o l s は、ODF内部処理において、極点図の回転方向が異なります。この結果として、ODF図も異なります。

同一ODFを得る為には、どちらかのODF入力極点図を逆回転極点図とすれば一致します。しかし、計算される再計算極点図は正規極点図と逆回転極点図の為、一致しません。

どちらのODF入力を正規極点図とすると、再計算極点図は一致するが、ODF図は一致せず、 $\{h k l\} \langle u v w \rangle$ の $\langle u v w \rangle$ が逆方向で計算されます。

以上の事を理解した上で、使い分けてください。