

# popLAによるTiのODF解析

Ti極点図からODF図、逆極点図表示

```
popLA: preferred orientation package - Los Alamos  
U.F. Kocks, J.S. Kallend, H.R. Wenk, et al.  
(Version May 1999)
```

以下のソフトウェアは最新版を使用してください。

GPODFDisplay	Ver 1. 15
HexaConvert	Ver 1. 09
InverseDispHexa	Ver 1. 13
MakePoleFile	Ver 1. 64-

popLAの解析

対称性 Triclinic → Orthorhombic (1/4対称)

Hermonic法とWIMV法で解析

popLAの入力データは $\alpha$ が80度であるが測定データが75度のため、  
75度のデータを強制的に80度として比較したが、改良はされない。

HermonicよりWIMVがゴーストも少なく実用的である。

2015年12月08日

*HelperTex Office*

材料-Ti¥20070126-フィルター-Ti¥ODFPoleFigure2¥work

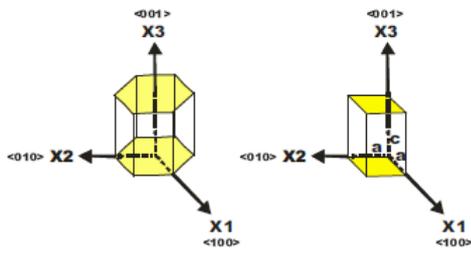
## 目次

1. 概要
2. popLAによるODF解析
  2. 1 popLA入力データ
3. HermonicによるODF解析
  3. 1 対称ODF結果をA-Typeで表示
    3. 1. 1 popLAのODF図表示はA-Typeの4指数表示
    3. 1. 2 AのODF図表示はB-Typeの4指数表示
4. 逆極点図 (InverseDisplayHexaソフトウェア)
5. 再計算極点図(MakePoleFile→GPPoleDisplay)
6. WIMV法
  6. 1 ODF図表示
  6. 2 逆極点図
  6. 3 再計算極点図
7.  $\alpha$ 範囲を強制的に80度としたHermonic
  7. 1 ODF図
  7. 2 逆極点図
  7. 3 再計算極点図
8.  $\alpha$ 範囲を強制的に80度としたWIMV
  8. 1 ODF図
  8. 2 逆極点図
  8. 3 再計算極点図

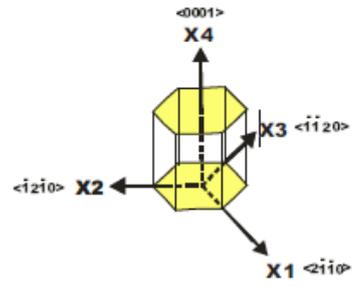
# 1. 概要

六方晶のODF解析では、結晶方位の表現方法が複数存在する。

## Miller Notation(3 Axis Notation)

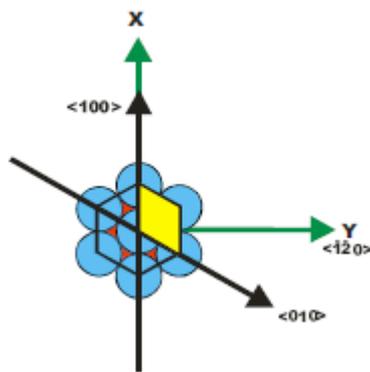


## Miller Bravais Notation(4 Axis Notation)

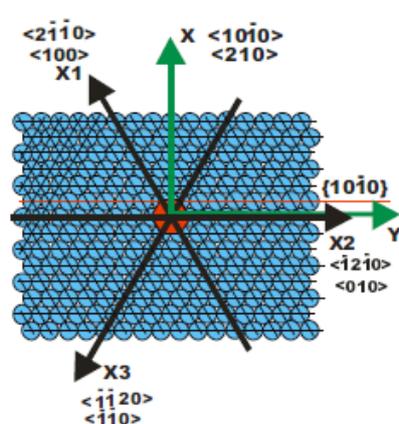
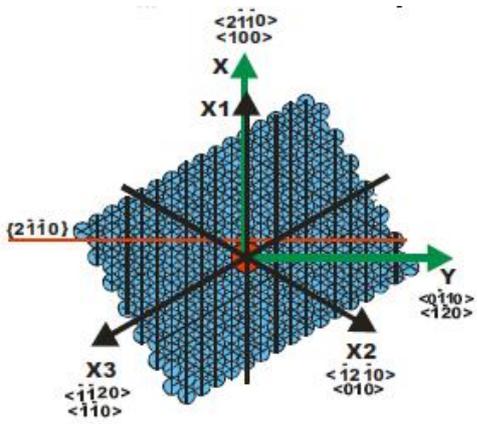
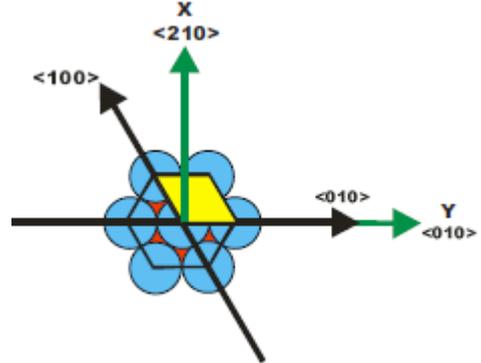


直交座標の取り方

### A-Type



### B-Type

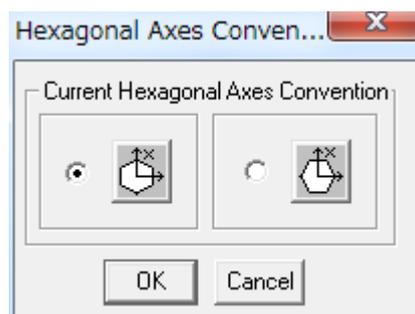


$$[100]-[-1-20]-[001]$$

$$[210]-[010]-[001]$$

$$[2-1-10]-[0-110]-[0001]$$

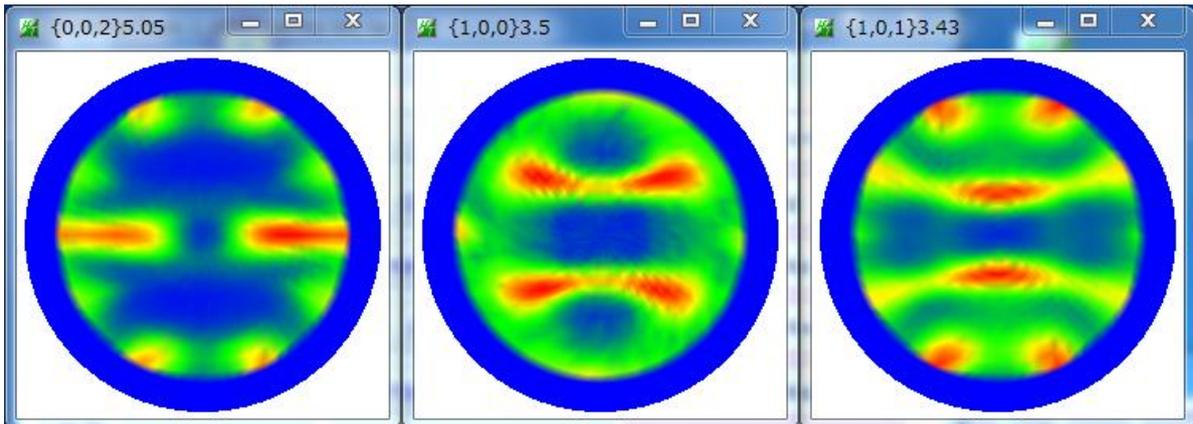
$$[10-10]-[11-20]-[0001]$$



この関係をTi材料で説明します。

## 2. popLAによるODF解析

### 2. 1 popLA入力データ



## 3. HermonicによるODF解析

P F t o O D F 3 で Hermonic - p o p L A 入力ファイル作成

 poplaCW.DFB	2015/12/07 7:12	DFB ファイル	1 KB
 poplaCW	2015/12/07 7:12	生データ	18 KB

E P F ファイル作成

**3. DIGEST Raw Data (.RAW), with exper.or theor. .DFB: make .EPF**

 POPLACW	2015/12/07 7:41	Exchange Certifi...	18 KB
---	-----------------	---------------------	-------

H C P ファイル作成し、F I L ファイル作成

**4. HARMONIC analysis: COMPLETE rim (.FUL), get Roe Coeff.file (.HCF)**

 POPLACW.FUL	2015/12/07 7:43	FUL ファイル	17 KB
 POPLACW.HCF	2015/12/07 7:43	HCF ファイル	1 KB

S H D ファイル作成 ( O D F 図 )

**4. Compute SOD or COD from harmonic coefficients (slow!)**

 POPLACW.SHD	2015/12/07 7:49	SHD ファイル	32 KB
---	-----------------	----------	-------

再計算極点図作成

**5. Recalculate pole figures .HPF**

 POPLACW.HPF	2015/12/07 7:51	HPF ファイル	5 KB
---	-----------------	----------	------

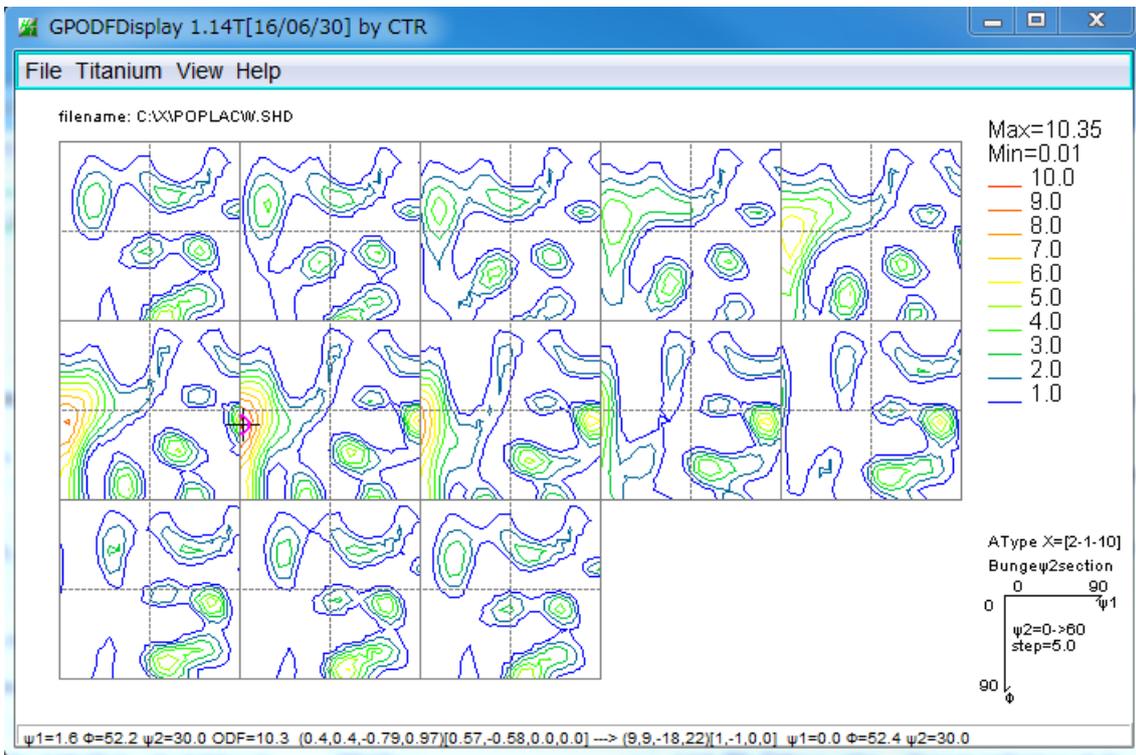
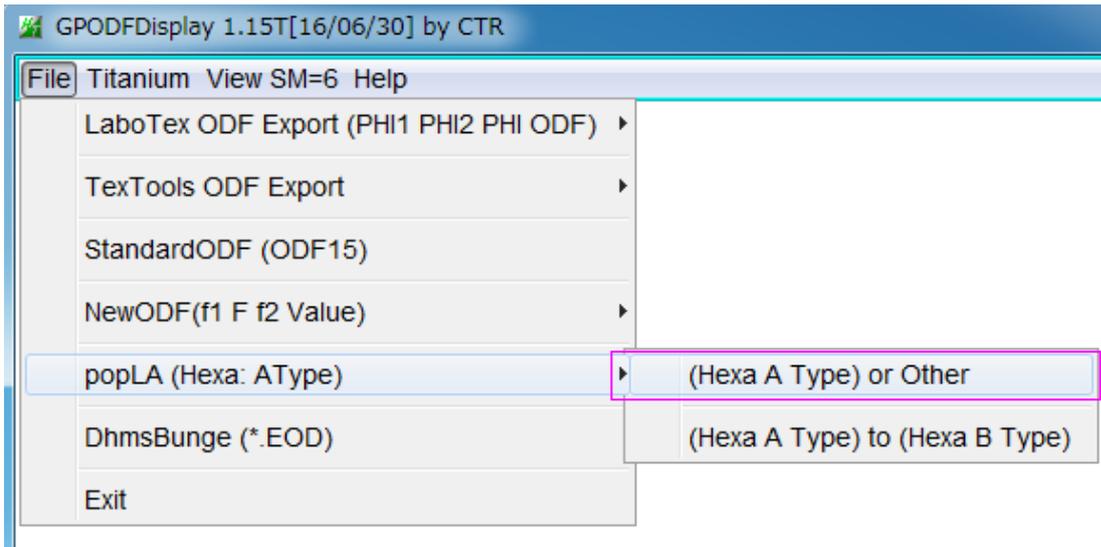
逆極点図作成

**6. Inverse pole figures .HIP**

 POPLACW.HIP	2015/12/07 7:53	HIP ファイル	5 KB
---	-----------------	----------	------

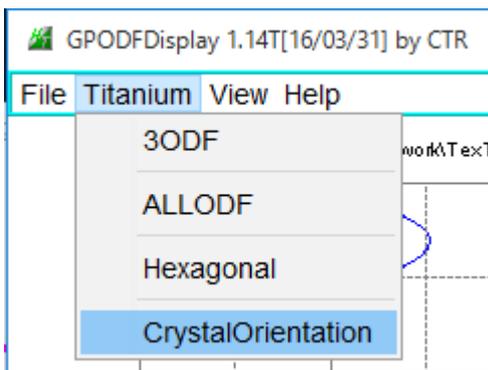
3. 1 対称 ODF 結果を A-Type で表示

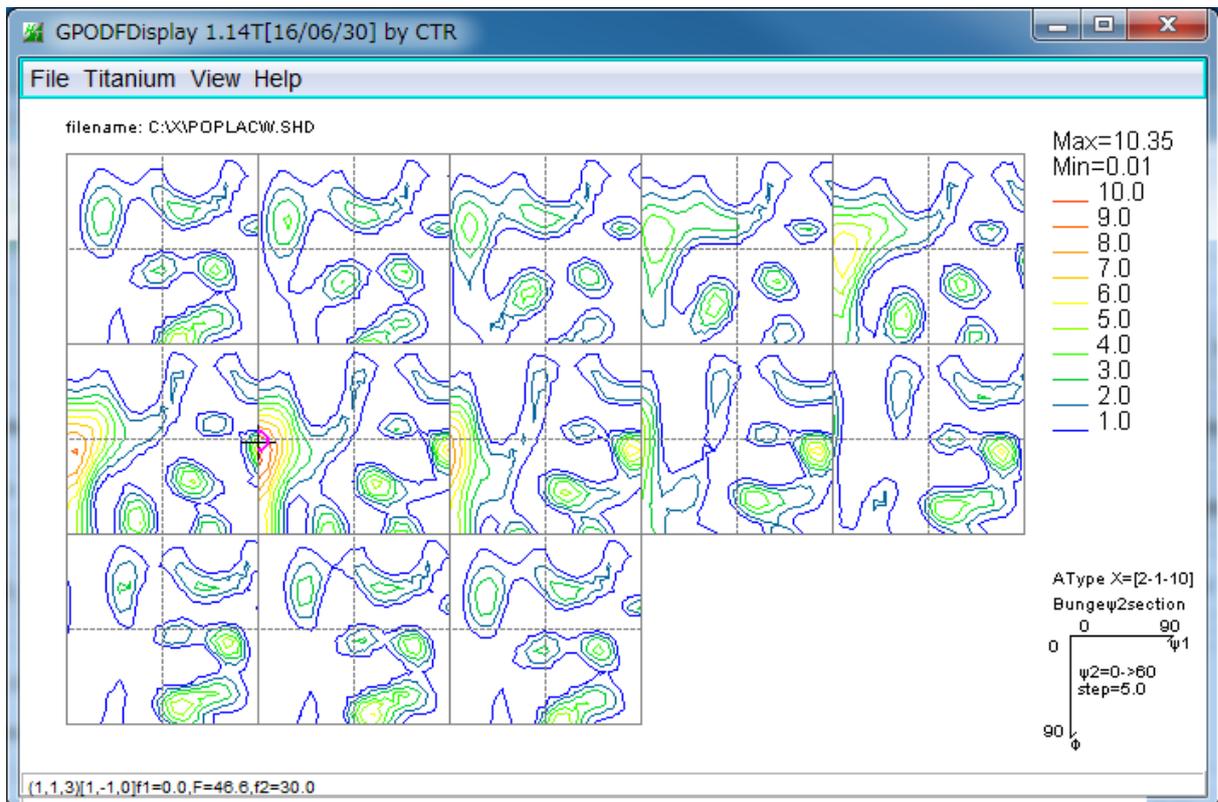
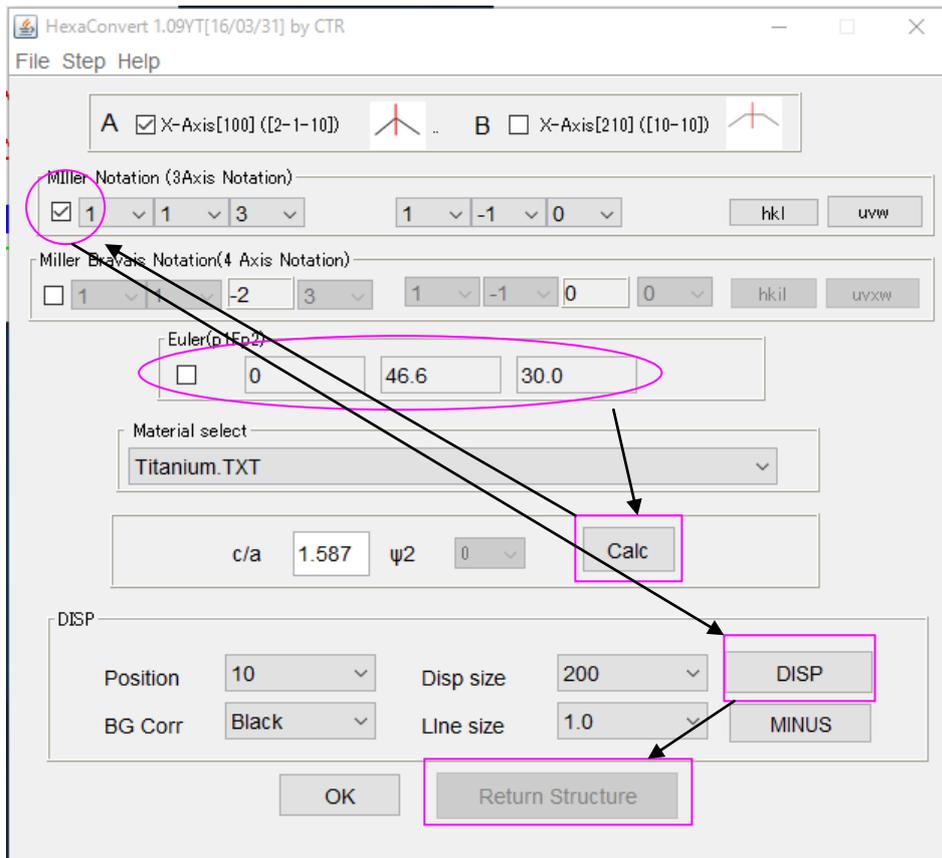
3. 1. 1 popLA の ODF 図表示は A-Type の 4 指数表示



3 指数表示に切り替えるには、CrystalOrientation で

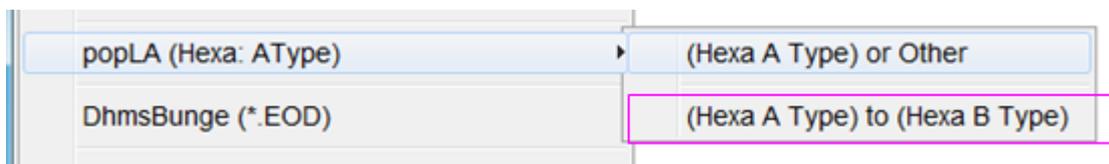
Euler 角度入力->Calc-> 3 指数選択->DISP->Return Structure





3 指数が表示される。

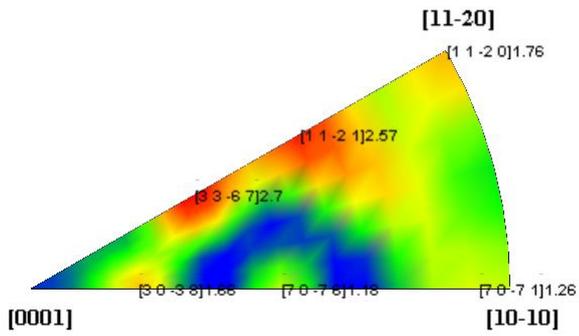
3. 1. 2 AのODF図表示はB-Typeの4指数表示



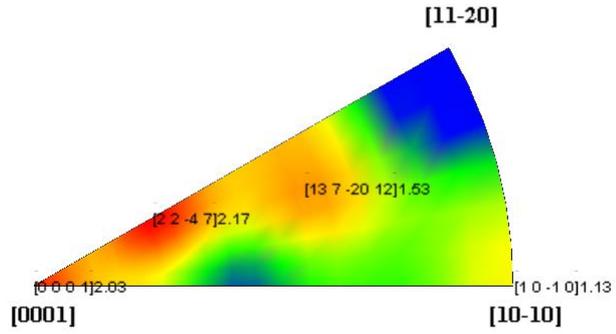
4. 逆極点図 (Inverse DisplayHexaソフトウェア)

方位計算は、Directionで計算されています。

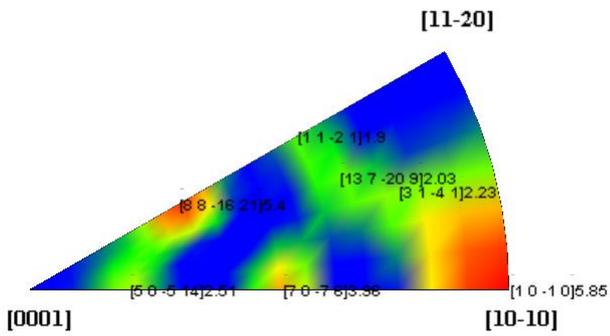
POPLACW.HIP\_SOP3\_Max=2.7



POPLACW.HIP\_SOP2\_Max=2.17

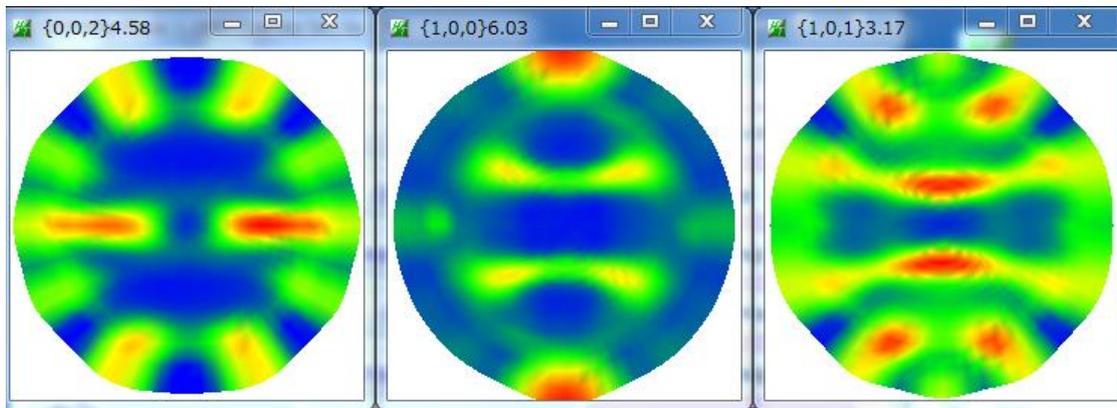


POPLACW.HIP\_SOP1\_Max=5.85

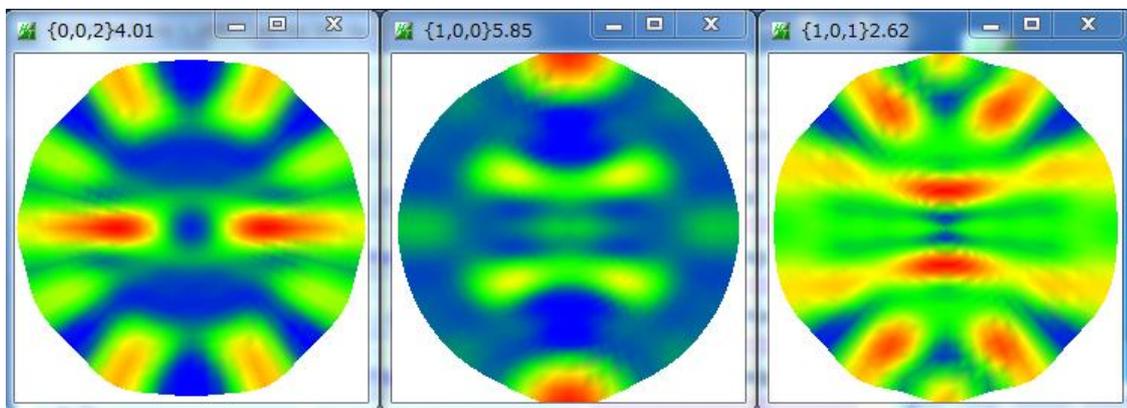


5. 再計算極点図(MakePoleFile->GPPoleDisplay)

F U L



H P F



## 6. WIMV法

### ODF解析

3. WIMV: make spec.SOD; calculate PFs and inverse PFs; make matrices

WIMV: make .SOD and recalc. pole figures .WPF -- for:  
2. cubic, tetra-,hexagonal crystals; sample diad: up to 3 PFs, 13 poles

```
0. Orthorhombic
1. Diad on Z
Enter 0 or 1 ==> 0

poplaCW 002-Ti_chR0B20D2S
002  5.0 75.0  5.0360.0 1 1 2-1 3  100  0
100  5.0 75.0  5.0360.0 1 1 2-1 3  100  0
101  5.0 75.0  5.0360.0 1 1 2-1 3  100  0
```

POPLACW.SOD	2015/12/09 2:55	SOD ファイル	33 KB
POPLACW.WPF	2015/12/09 2:55	WPF ファイル	5 KB

再計算極点図

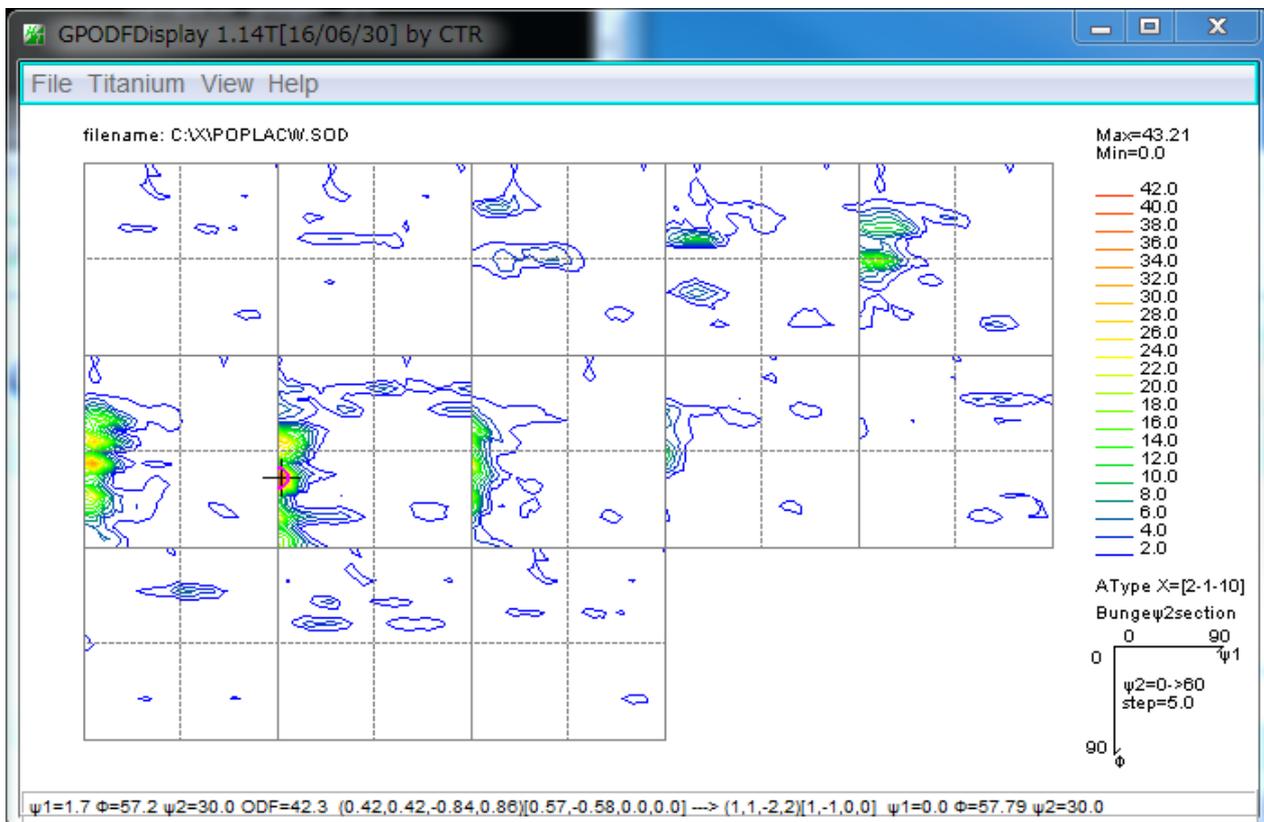
POPLACW.WPF	2015/12/09 2:55	WPF ファイル	5 KB
-------------	-----------------	----------	------

逆極点

7. Calculate INVERSE pole figures from .SOD: .WIP

POPLACW.WIP	2015/12/09 2:56	WIP ファイル	5 KB
-------------	-----------------	----------	------

### 6. 1 ODF 図表示

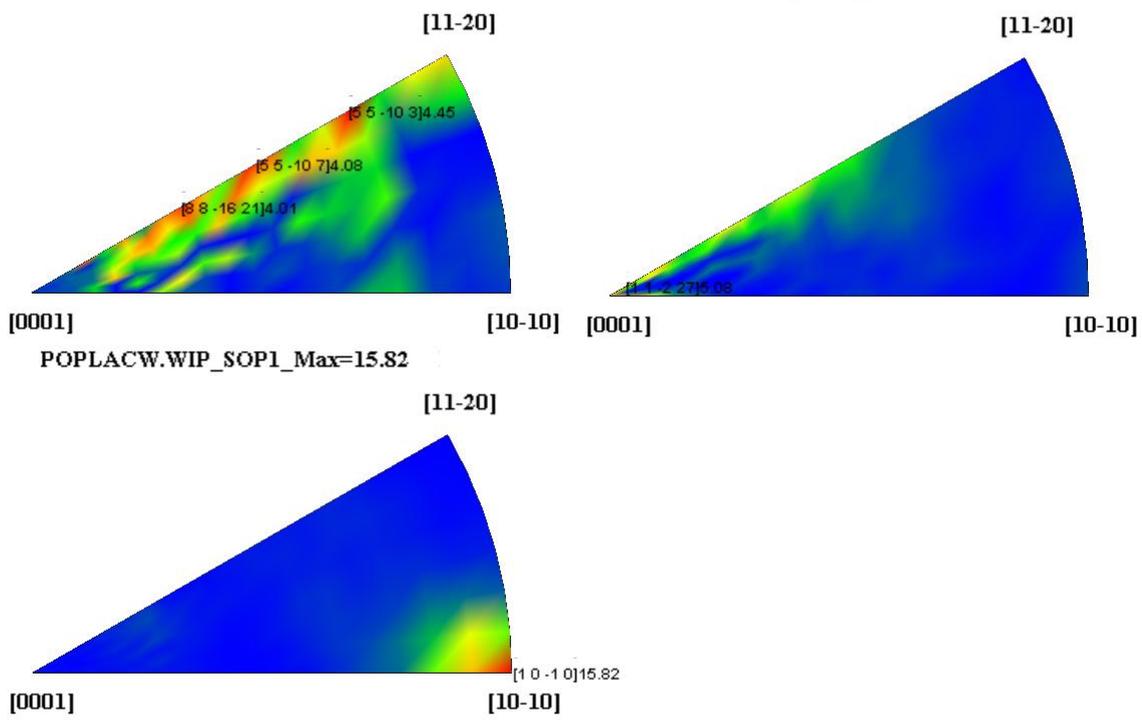


## 6. 2 逆極点図

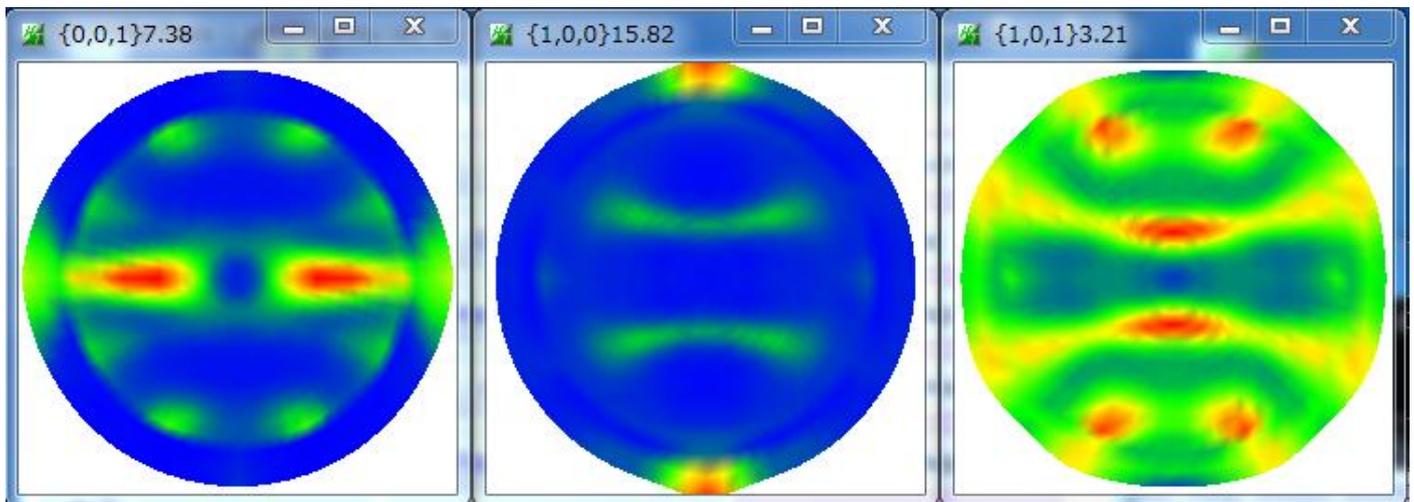
方位計算は、Directionで計算されています。

POPLACW.WIP\_SOP3\_Max=4.45

POPLACW.WIP\_SOP2\_Max=5.08

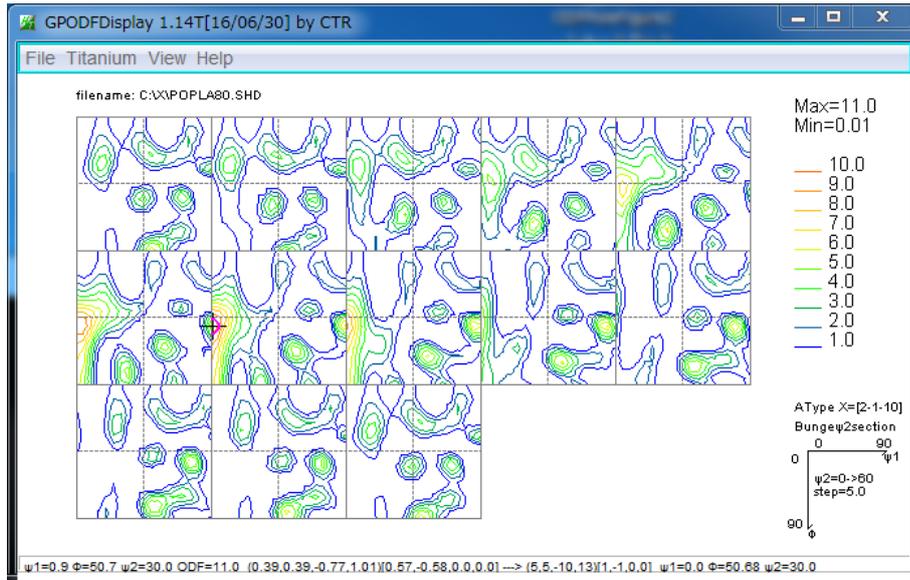


## 6. 3 再計算極点図



7.  $\alpha$  範囲を強制的に 80 度とした Harmonic

7. 1 ODF 図

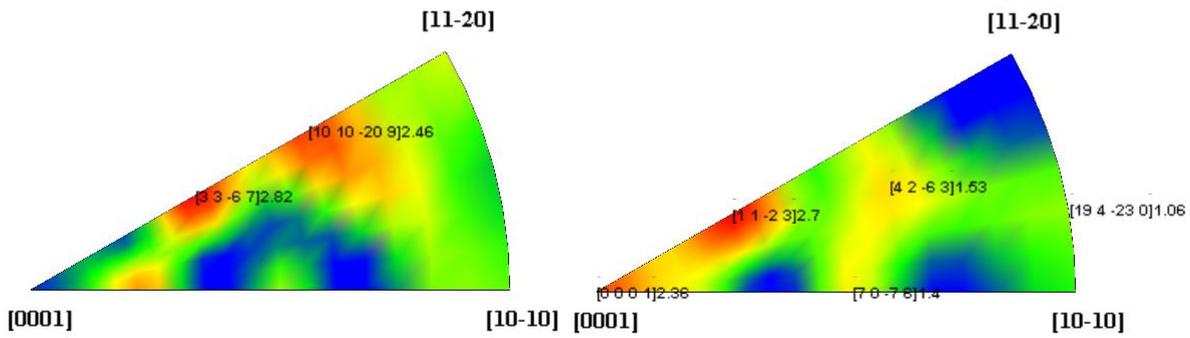


7. 2 逆極点図

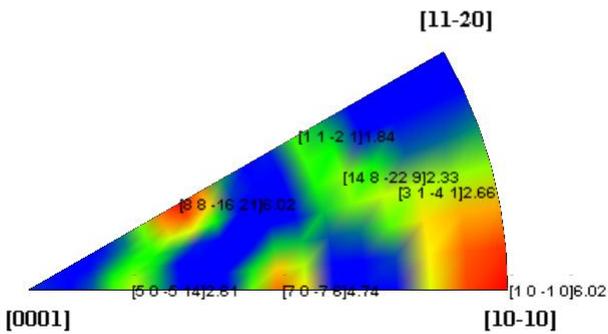
方位計算は、Direction で計算されています。

POPLA80.HIP\_SOP3\_Max=2.82

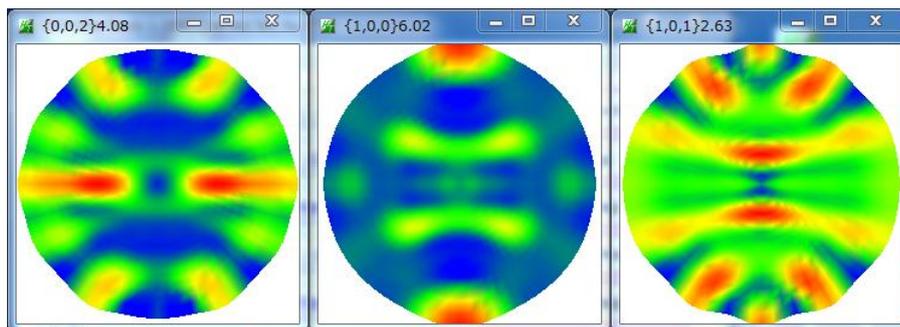
POPLA80.HIP\_SOP2\_Max=2.7



POPLA80.HIP\_SOP1\_Max=6.02

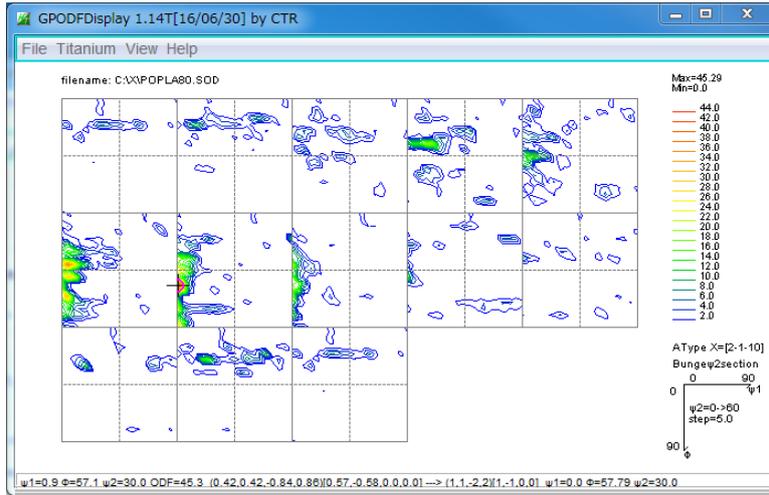


7. 3 再計算極点図



## 8. $\alpha$ 範囲を強制的に 80 度とした WIMV

### 8. 1 ODF 図



### 8. 2 逆極点図

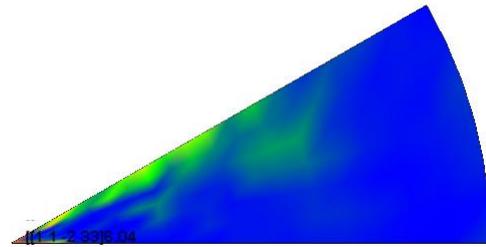
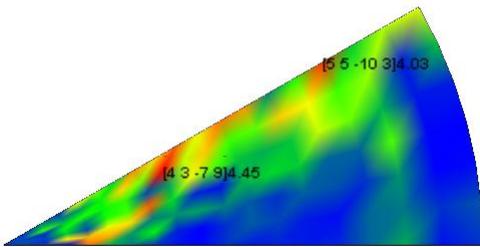
方位計算は、Directionで計算されています。

POPLA80.WIP\_SOP3\_Max=4.45

POPLA80.WIP\_SOP2\_Max=6.04

[11-20]

[11-20]



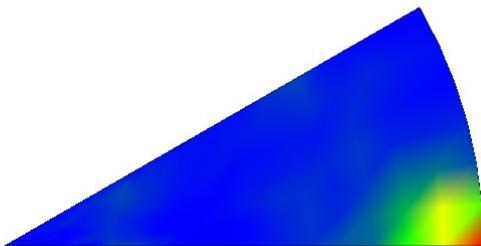
[0001]

[10-10] [0001]

[10-10]

POPLA80.WIP\_SOP1\_Max=16.78

[11-20]



[0001]

[10-10]

### 8. 3 再計算極点図

