

## Hexagonalで逆極点内側の結晶方位と逆極点図

{-1 2 -1 1} <7 2 -2 -5 6>の非対称逆極点図では[1 0 -1 0]軸で平均化したHexagonal逆極点図( $\phi$ 範囲30-60)では比較できないが、平均前の( $\phi$ 範囲0->30)で比較できます。**結果はずれが認められます。**

非対称逆極点図では平均値の確認ではなく、[1 0 -1 0]軸の上下逆極点図の確認が必要  
LaboTexでは逆極点図の上下確認できます。

2019年10月22日

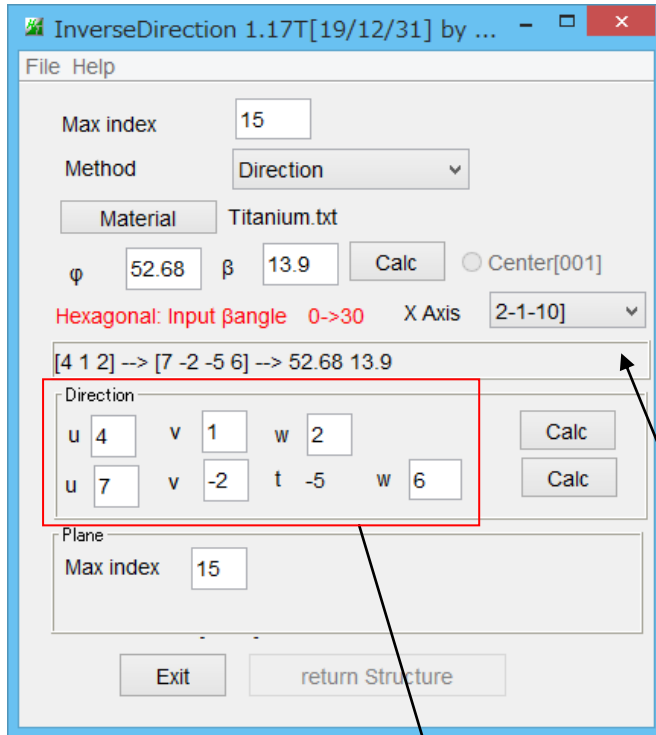
*HelperTex Office*

## 概要

チタン合金のシュミレーションを行っているとき結晶方位  $\{hkl\} \langle uvw \rangle$  のRD逆極点図が  $\langle uvw \rangle$  と異なるケースがある事に気が付きました。LaboTexでシュミレーションすると逆極点図が、 $[10-10]$  に対し非対称の逆極点図で発生しているように見えます。

では逆極点図の内側非対称方位ではどのように計算されるかシュミレーションしてみます。

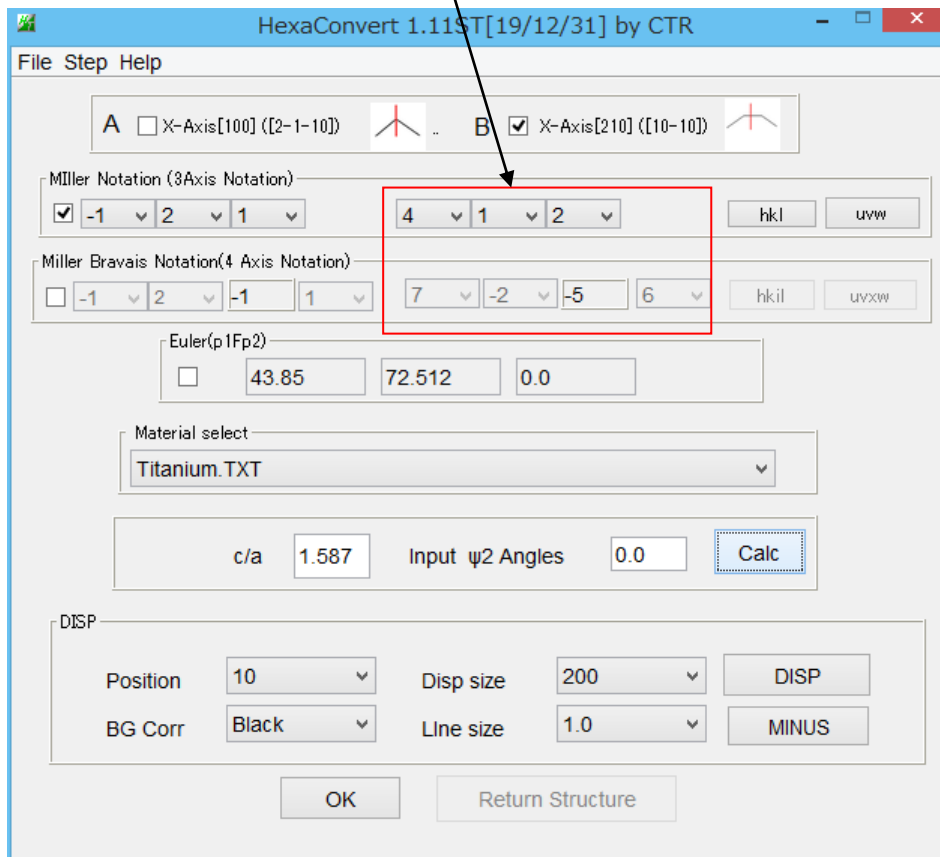
例えば



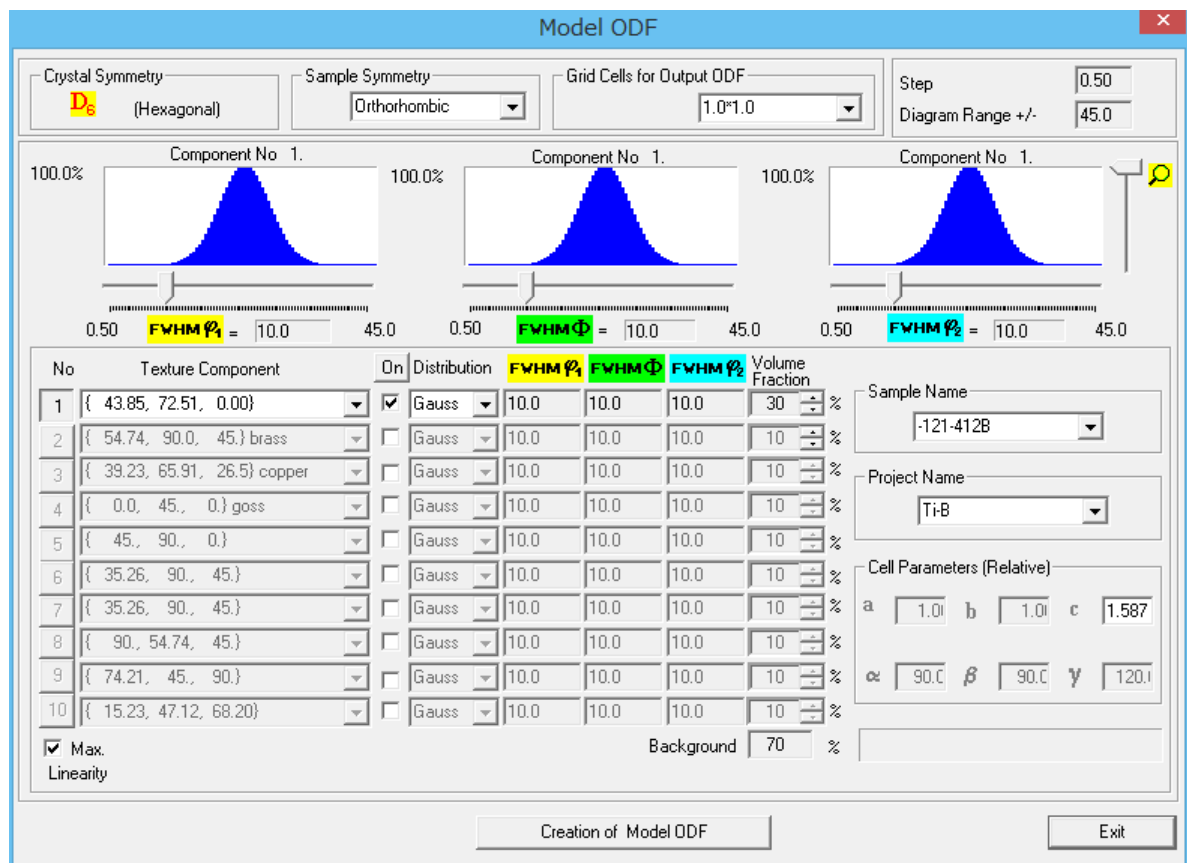
の  $\langle uvw \rangle$  の結晶方位を考えます。

$[10-10]$  の下側に現れます。

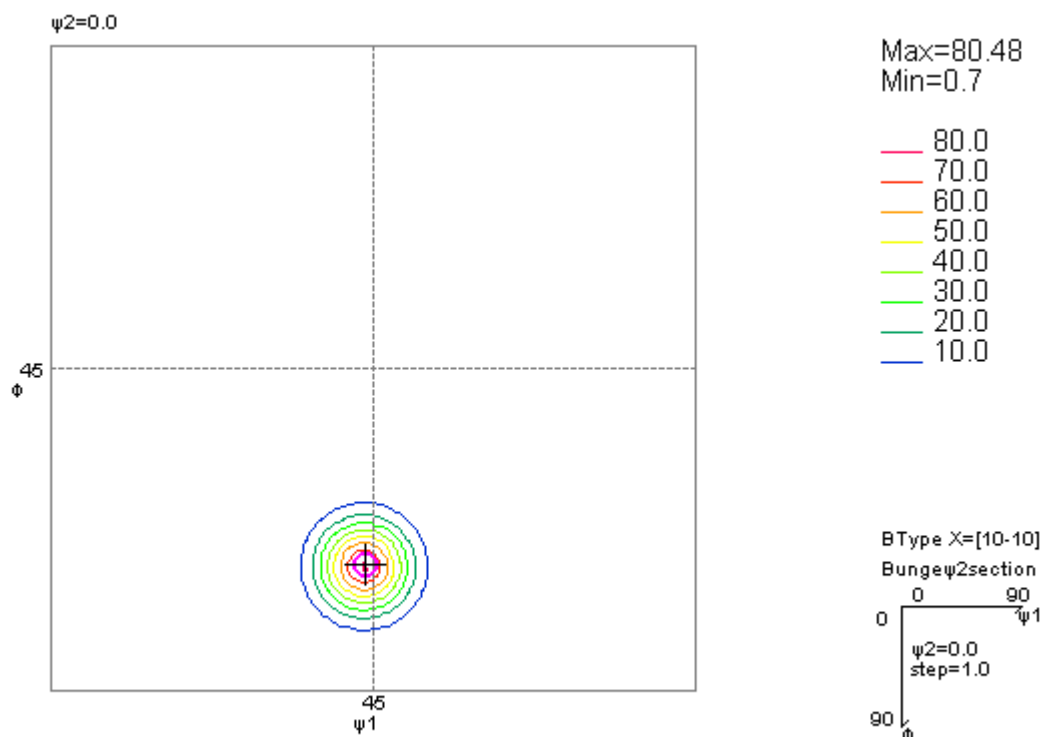
結晶方位は



# ODF 図の Create



計算された位置に方位のMaxが計算されます。

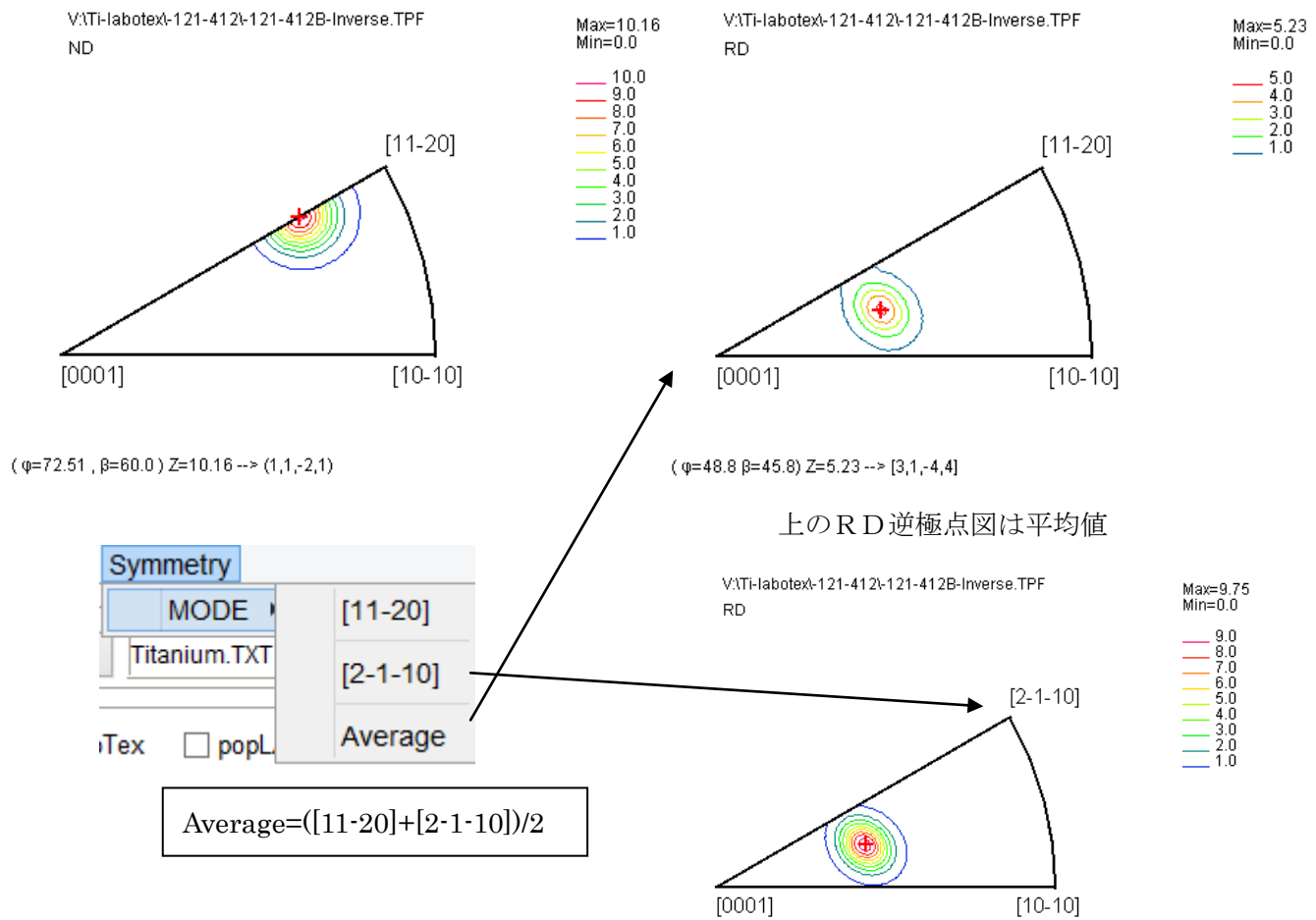


$(-1,2,1)[4,1,2]f_1=43.9,F=72.5,f_2=0.0$  ODF=80.48

$(-1,2,-1,1)[7,-2,-5,6]f_1=43.9,F=72.5,f_2=0.0$  ODF=80.48

49/10/00

計算された逆極点図



上のRD逆極点図は平均値

RD逆極点図は、非対称で、 $[2-1-10] - [10-10]$  の方位を  $[10-10]$  軸に  
対称操作を行ったため、方位がずれているように見えます。

平均値ではずれが確認出来ますが、平均前の逆極点図ではずれはありません。

ODF図で計算された  $(-1, 2, -1, 1)[7, -2, -5, 6]f_1 = 43.9, F = 72.5, f_2 = 0.0$  ODF = 80.48 とずれが認められる。

46	1.44	1.72	2.08	2.52	3.05	3.66	4.33	5.09	5.75	6.43	7.04	7.53	7.87	8.02	<b>7.98</b>	7.74	7.32	6.77	6.1
47	1.43	1.72	2.1	2.57	3.14	3.8	4.54	5.34	6.15	6.94	7.65	8.25	8.67	8.9	<b>8.9</b>	8.68	8.26	7.66	6.93
48	1.38	1.67	2.04	2.52	3.09	3.78	4.55	5.4	6.28	7.14	7.95	8.63	9.15	9.45	<b>9.51</b>	9.33	8.82	8.31	7.55
<b>49</b>	<b>1.29</b>	<b>1.55</b>	<b>1.9</b>	<b>2.35</b>	<b>2.91</b>	<b>3.57</b>	<b>4.34</b>	<b>5.19</b>	<b>6.1</b>	<b>7.01</b>	<b>7.87</b>	<b>8.63</b>	<b>9.22</b>	<b>9.61</b>	<b>9.75</b>	<b>9.64</b>	<b>9.27</b>	<b>8.69</b>	<b>7.93</b>
50	1.17	1.39	1.69	2.07	2.56	3.15	3.85	4.63	5.48	6.35	7.19	7.95	8.57	9	<b>9.21</b>	9.18	8.9	8.39	7.71
51	1.06	1.23	1.47	1.79	2.2	2.71	3.31	4.01	4.78	5.58	6.37	7.11	7.73	8.19	<b>8.44</b>	8.46	8.26	7.84	7.24
52	0.95	1.08	1.26	1.5	1.82	2.22	2.7	3.27	3.9	4.57	5.25	5.9	6.47	6.91	<b>7.19</b>	7.27	7.16	6.85	6.38
53	0.85	0.97	1.13	1.37	1.7	2.1	2.6	3.15	3.75	4.4	5.1	5.7	6.2	6.5	<b>6.75</b>	6.8	6.6	6.3	5.9

最大密度は (49, 14) に計算されている。