結晶系によって表示方法が異なる

逆極点図の表示方法



http://www.geocities.jp/helpertex2

Measure-data¥逆極点図の表示方法

- 目次
- 1. 概要
 - 1.1 使用しているソフトウエア
- 2. θ/θ -scan の例
- 3. ODF 解析後の逆極点図
 - 3.1 Cubic
 - 3. 2 Hexagonalを等高線描画(InverseDisplay ソフトウエア)
 - 3. 3 Hexagonal (チタン)
 - 3. 4 Hexagonalを等高線描画(InverseDisplay ソフトウエア)
 - 3.5 Tetragonal (Nd2Fe14B)
 - 3.6 Orthorombic (PE)
 - 3. 7 Monoclinic (Polypropylene)

1. 概要

結晶方位に関して、極点図、逆極点図、ODF図などがあり、逆極点図表示では方位(Direction) と回折面(Plane)の2種類あります。

Direction 表示は、ODF 解析後の逆極点図であるが、ODF 解析後でも Plane 表示するケースもあります。 Plane 表示はプロファイル(θ/θ-scan)測定による random 試料との比で表示しているソフトウエアもあ ります。この場合、Cubic、Hexagonal に対応



Direction は、ND 方向,Plane は{hkl}面である。

この Direction と Plane は Cubic では一致するが、Cubic 以外は一致しないケースもあります。

逆極点図の Direction <-> Plane 変換計算ソフトウエアとして, Inverse Direction ソフトウエアがあります。 Cubic, Hexagonal, Orthorombic, Tetragonal に対応しています。

🎽 InverseDirection 1.11MT[17/03/31] by C – 🗖 🗙
File Help
Max index 15 Method Direction ~
Material Titanium.txt
φ 90 β 0 Calc
Direction
u 1 V 1 w 0 Calc
u 1 v 1 t -2 w 0 Calc
Plane Max index 15

ODF 解析は TexTools で逆極点図を作成、ND,TD,RD の計算が行えるが、主に ND 方向を記載

1. 1 使用しているソフトウエア

極点図作成

LaboTex

- ODF解析し逆極点図作成 TexTools
- TexTools逆極点データをTXT2変換 MakePoleFile
- Direction<->Plane変換確認 InverseDirection

θ/θ 測定データから逆極点図表示 ProfiletoDivisionProfile InverseAll

逆極点図表示

GPInverseDisplay (InverseCounterDisplay) (InverseCubicContourDisplay)

ODFソフトウエア(LaboTex, TexTools)以外、CTRソフトウエアに含まれます。

2. θ/θ -scan の例



アルミニウムの粉末(赤)とH材(青)の回折プロファイル

連続プロファイルから分割プロファイルに変換

逆極点図に表示する。

ProfiletoDivisionProfile 1.06MT[17/03/31] by CTR	- 🗆 🗙
File Help	
Material List	
Full Profiles(ASC) or Division profiles(ASC) Files C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum Select files number	er =11 List
Smoothing Data scope condition for division 3 ± 1.8 deg. Change © Create(NEWFILE)	Execute
	InverseAll

同一ホルダにある複数の連続プロファイルを一括変換します。(11プロファイルを選択しています)

<u>24</u>	ProfiletoDivisionProfile 1.06MT[17/03/31] by CTR – 🗆 🗙
File Help	
Material	Aluminum
Full Profiles(A	SC) or Division profiles(ASC)
Files v	C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum Select files number =11 List
Smoothing 3	Data scope condition for division Index change datafile(division files to NEWFILE) ± 1.8 deg. ○ Change © Create(NEWFILE)
	Division file has been Created !! InverseAll

変換が終了したら、InverseAll に移ります。

InverseAll 1	.08MT[17/03/31] by CTR	- 🗆 🗙
File ProfiletoDivisionProfile Condition initialize Help		
Random Inverse V	Aluminum List	
RandomSelect(division ASC) MeasureData C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILE\r	random-plate.ASC Disp	
Data select(ASC) Dir Files Files Select files=10	Asc files number 10 List Previous N SelectFile C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILE\A-H18	lext DISP
Smoothing points 3	Standardization Calc Disp	

Random ファイルと被検ファイルを指定し、分割ファイルの面積を計算し、random との比率を計算

<u>14</u>		TextDispl	ay 1.13M C:	¥CTR¥DATA¥	Profile-Invers	se¥Aluminum	1 ¥NEWFILE¥I	result.txt	_ 🗆 🗅
File Help									
Randomm	ode Standard	lization BGsmp	points=3 PEAK	(
	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
A-H18	0.475	1.137	1.529	2.72	0.335	1.148	0.582	1.132	1.632
A-T4	0.322	2.984	0.433	0.739	0.202	5.02	0.547	1.104	0.189
Al-powder	1.016	1.005	0.967	0.961	0.957	0.989	1.02	0.974	0.995
B-H18	0.63	1.102	2.016	1.486	0.427	0.874	1.146	0.972	1.237
B-O	0.456	2.427	0.555	0.924	0.558	4.253	0.675	1.006	1.045
C-Bach	0.103	2.703	1.478	1.064	0.06	4.301	0.689	1.052	1.238
C-CAL	0.464	2.538	0.9	0.664	0.463	2.937	0.532	0.757	0.511
D-H14	0.193	1.534	1.602	3.192	0.117	1.919	0.462	1.442	1.027
D-H18	0.178	0.766	2.585	3.893	0.097	0.635	0.394	1.091	1.787
D-O	0.013	3.437	0.654	0.902	0.037	6.533	0.29	0.892	0.806

この計算結果から逆極点図を InverseDisp で表示します。

24	InverseDisplay 1.11MT[17/03/31] by CTF	2 – – <mark>×</mark>
File Help Inverse[hkl] Other Average	OFF Dataexpand OFF	
ODF	StdODF ND V DETEXTools	☑ Other
C:\CTR\DATA\Profile-Inve	rse\Aluminum\NEWFILE\result.txt	A-H18 ~
[Inverse		
Max level 2.72 2D	3D Max-value(Max 1.0) 0.15	Data Disp List Dsiplay
WindowsWidth 800 🗹 D	isp Intens. Random Level 1.5	[hkl] Intens. InverseDsiplay
計算結果ファイル	逆極点表示を選択	逆極点図の表示



表示は、Direction で行われているが、Cubic では Plane と同一である。 InverseDisplay は Cubic に限ります。Cubic 以外は GPInverseDisplay で行います。

3. ODF 解析後の逆極点図

Cubic,Hexagonal,Orthorombic,Tetragonal に関しては、GPInverseDisplay で対応

GPInverseDisplay 1.05MT[17/03/31] by CTR – 🗆 🗙
File Help
Material A-Iron-Measure-IntegralData.TXT a 1.0 b 1.0 c 1.0 α 90.0 γ 90.0 ODF
Method Plane max index Direction max index Direction Miller Nortation(3 Axis Nortation) 15 15
Inverse data select C:\ODF\ODF16 List ND
Inverse Display Diverse max val 2D-3D 2D v 3D Max value 0.0 SD Max value 0.3 < 1.0 800 Full Inverse disp Inverse data
Peak data Other font size ContourDisplay Disp Font size Filename 12 v Base 12 v Level Peak serach

各種 ODF 解析データの表示を同一表示で比較できます。

Cubic,Hexagonal,tetragona,Orthrombic に対応 逆極点表示を Direction<->Plane 変換

逆極点図の 2D,3D,等高線表示

2D, 3D表示では極位置のピークサーチと指数付け

等高線表示ではマウス位置のリアルタイム方位計算

3.1 Cubic



VolumeFraction



逆極点図



[001],[101],[111]以外に[112]が検出されています。

3. 3 Hexagonal (チタンの場合)



逆極点図(ND を表示)

六方晶の逆極点表示では、3指数<->4指数表示,Direction<->Plane表示があります。
計算最大ミラー指数を7とした場合



ND.HIPF_Max=10.2

3. 4 Hexagonal を等高線描画(InverseDisplay ソフトウエア)



InverseDisplay ソフトウエアは、TXT データを読み込み、指定された格子定数から指数変換します。 Hexagonal では、4指数で表示しています。

3.5 Tetragonal (Nd2Fe14B)



逆極点図(NDを最大指数7で計算)



ND.HIPF_Max=10.2





等高線表示は Direction 表示

3.6 Orthorombic (PE)



逆極点図(NDを最大指数5で表示)



[001]

[100] [001]

[100]

ND.HIPF_Max=15.8



ND.HIPF_Max=15.8

3. 7 Monoclinic (Polypropylene)



逆極点図



RD



ΤD

