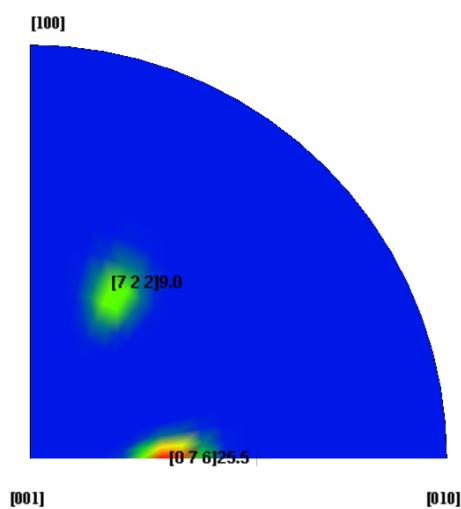


LaboTex、TexToolsのOrthorombic逆極点

LaboTexで計算されている逆極点図のPlane指数は理解できないが
Exportされる逆極点データは、GPInverseDisplayで計算可能

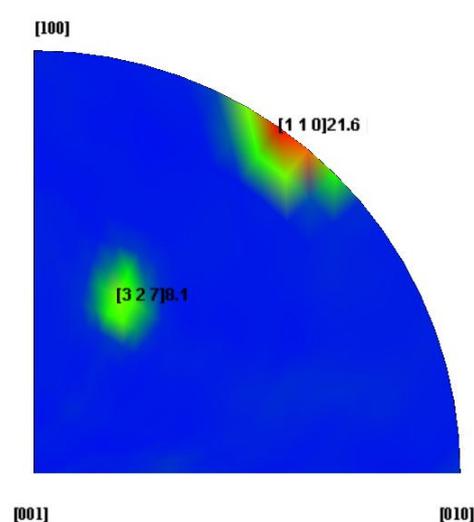
LaboTexとTexToolsでは、格子定数の取り方が異なるため、
極点図のミラー指数
ODF図
逆極点図
が異なります。

LaboTex 表記



012-100-113-1-10-20-Inverse.TPF ND_Max=25.5

TexTools 表記



ND.HIPF_Max=21.6

TexToolsは、Monolinicに於いて、LaboTexと同様な格子定数の指定が可能ですが、解析結果の逆極点図が異なるので、注意してください。

016年10月27日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

概要

LaboTeXの逆極点図は不可思議の描画が行われている。

逆極点図にもかかわらず、Planeで表示されているが、表示されている計算指数が理解できない。ポリエチレンを例に、 $\{012\}<100>$ と $\{113\}<1-10>$ のODF図を作成し、逆極点図の計算を行って、同じ計算をTexToolsで確認する。

TexToolsは、ICDD表記であるが、Orthorombicは格子定数を無理やりLaboTeXに合わせることが出来るので、確認は可能、解析ODFに使用した格子定数に合わせた解析で行ってください。

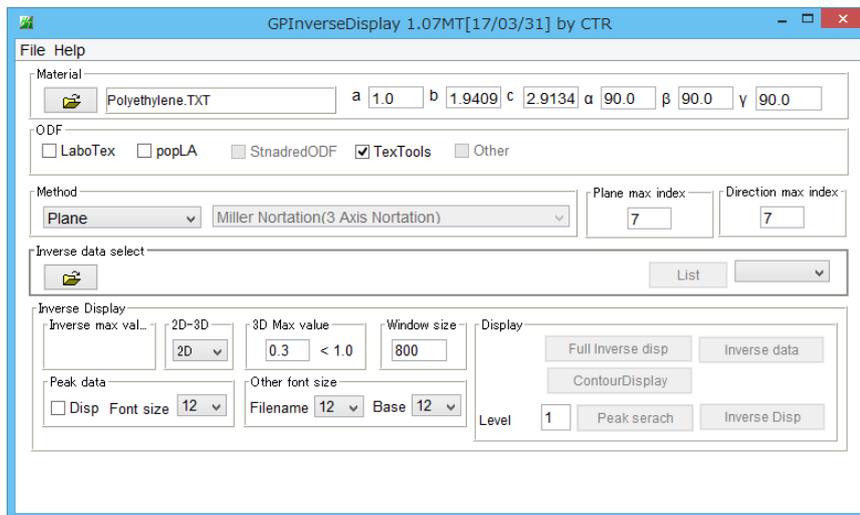
$\{012\}<100>$ と $\{113\}<1-10>$ であれば、ND方向のPlaneでは、 $\{012\}$ と $\{113\}$ に極がある事になります。

評価に使用したソフトウェア

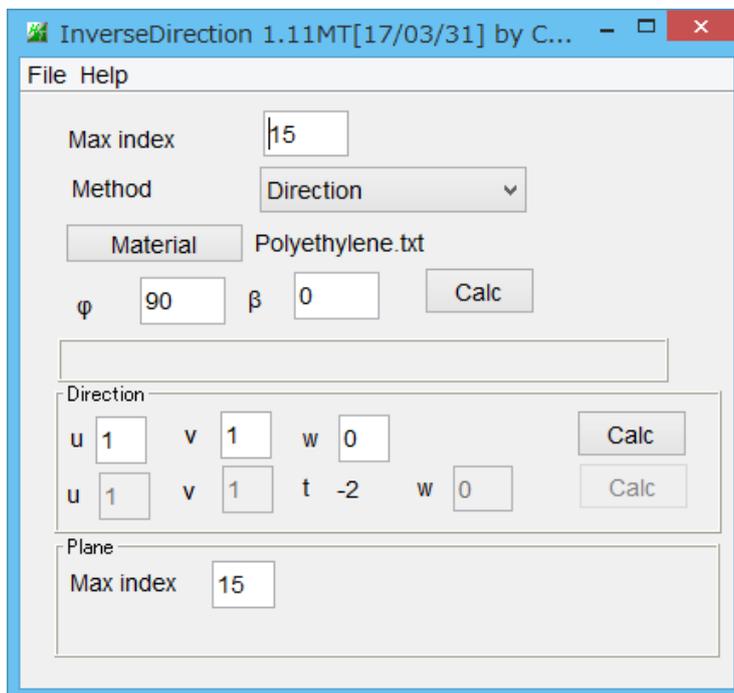
LaboTeX 3. 0

TexTools 3. 3

GPInverseDisplay 1. 07



InverseDirection 1. 11

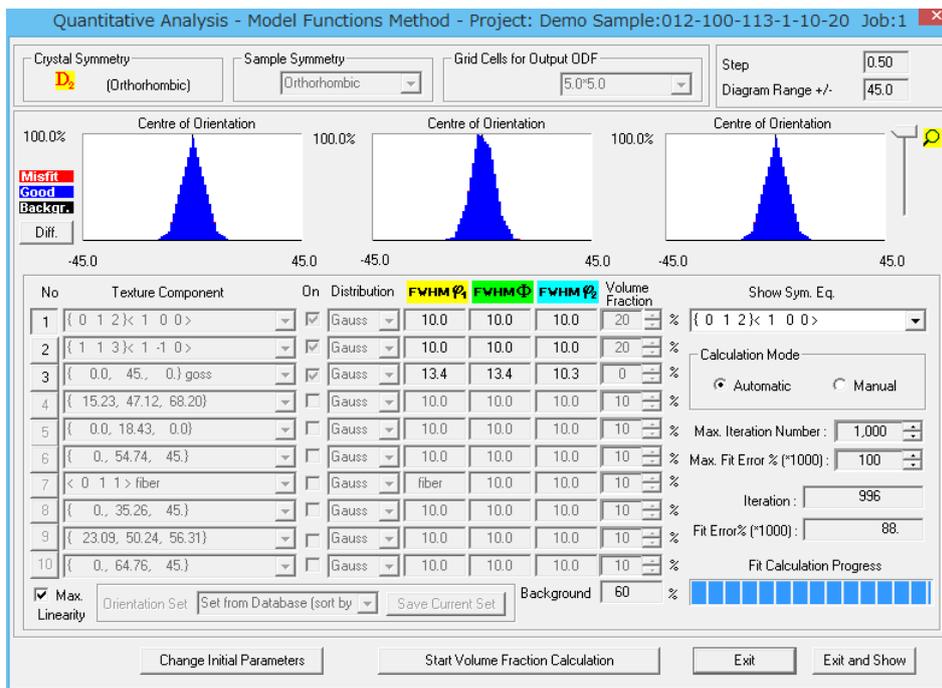


InverseCounterDisplay 1. 08

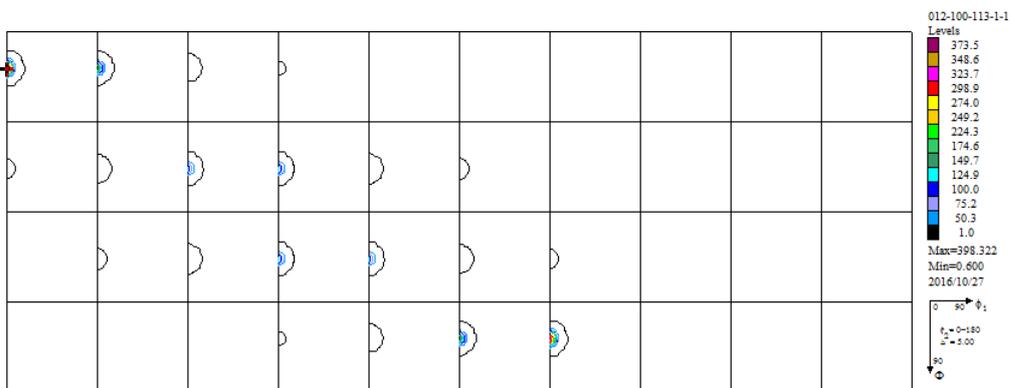
InverseDisplayXY

逆極点(ϕ 、 β)から(hkl)の計算は、 ϕ は[001]からの角度、 β は[100]からの角度

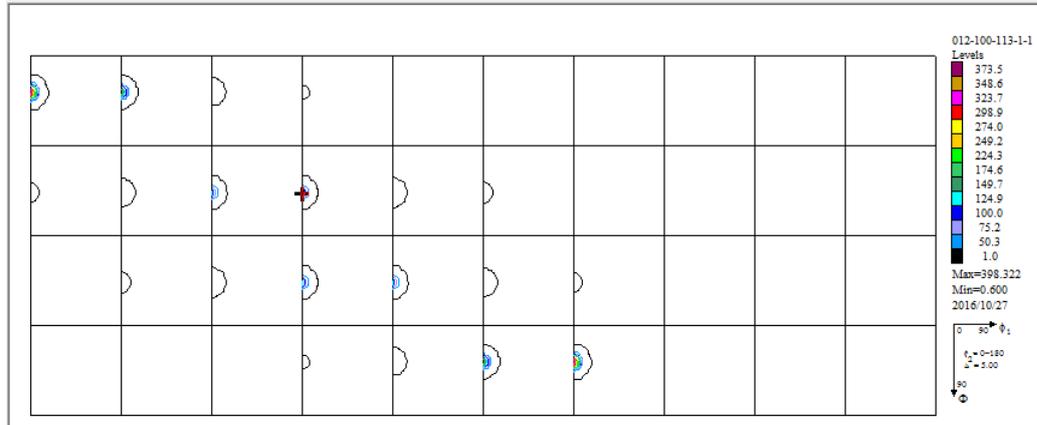
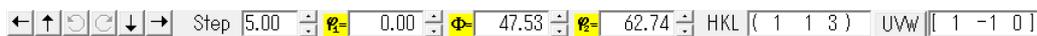
作成した ODF



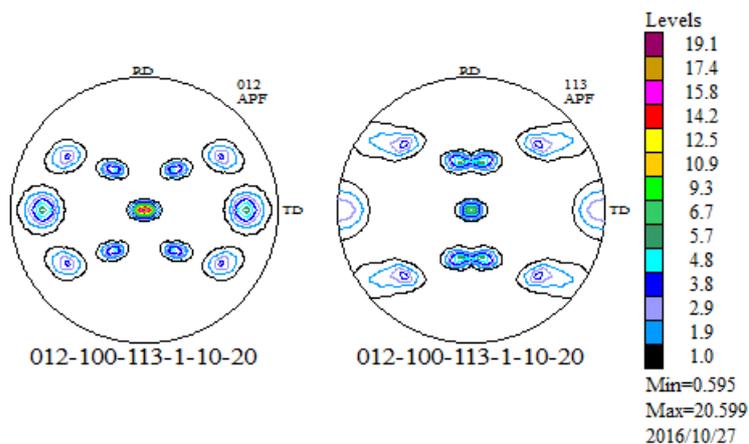
{012}<100>が検出される



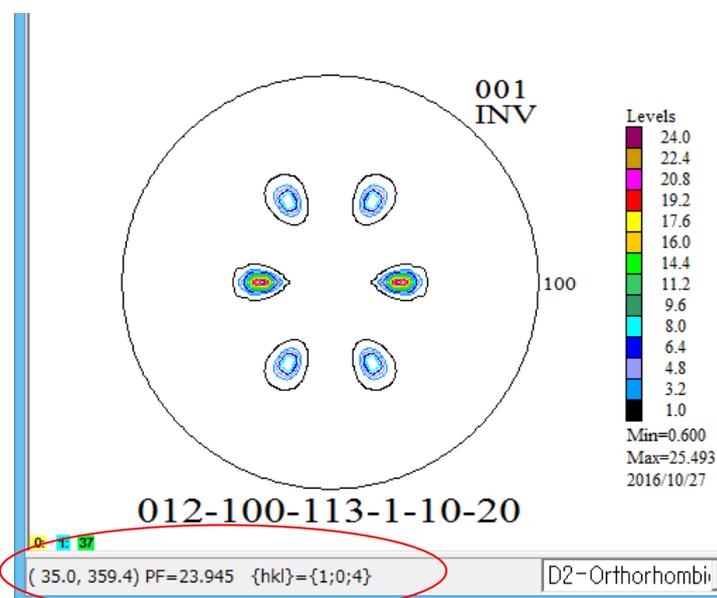
{113}<1-10>も検出される。



計算される極点図



計算された逆極点図

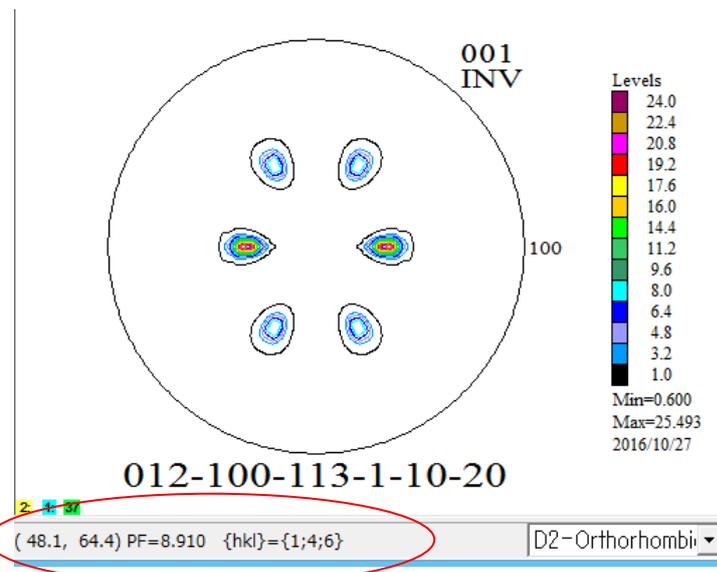


{012}と{113}が検出されない
 $\beta = 0$ が右側にある。
 ここに問題があると思われる

InverseDirection 1.11MT[17/03/31] by C...

File Help

Max index: 15
 Method: Plane
 Material: Polyethylene.txt
 ϕ : 36.89 β : 90.0 [Calc]
 (0 1 2) --> 36.89 90.0
 Plane
 h: 0 k: 1 l: 2 [Calc]
 h: 1 k: 1 t: -2 l: 0 [Calc]



InverseDirection 1.11MT[17/03/31] by C...

File Help

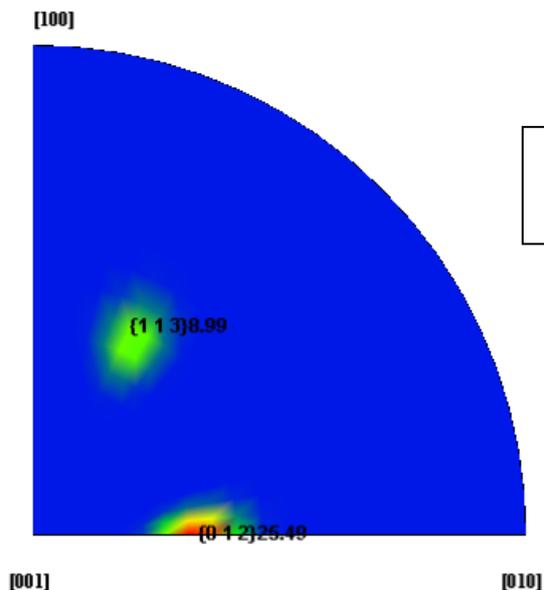
Max index: 15
 Method: Plane
 Material: Polyethylene.txt
 ϕ : 47.53 β : 27.26 [Calc]
 (1 1 3) --> 47.53 27.26
 Plane
 h: 1 k: 1 l: 3 [Calc]
 h: 1 k: 1 t: -2 l: 0 [Calc]

β 軸が 90 度シフトして計算される。

Labotexの逆極点図を Export して GPIInverseDisplay で計算

Plane 計算

Method: Plane Miller Notation(3 Axis Notation) Plane max index: 7 Direction max index: 7



| | | | | | |
|---------|-------|------|-------|-------|------|
| {0 1 2} | 37.11 | 90.0 | 25.49 | 37.11 | 0.0 |
| {1 1 3} | 50.0 | 25.0 | 8.99 | 50.0 | 65.0 |

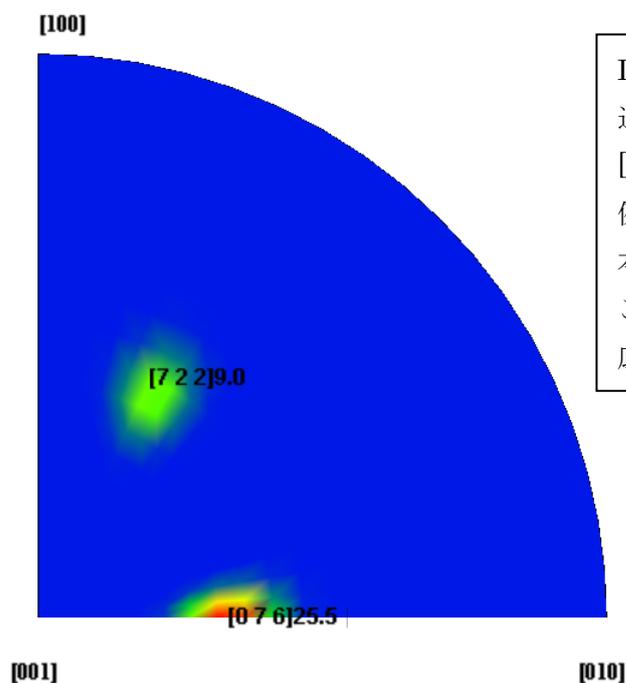
データの並びは
 指数 φ角度 β角度 密度 表示φ角度 表示β角度

{012},{113}が検出されます
 β = 0 は真上である

012-100-113-1-10-20-Inverse.TPF ND_Max=25.5

Direction 計算

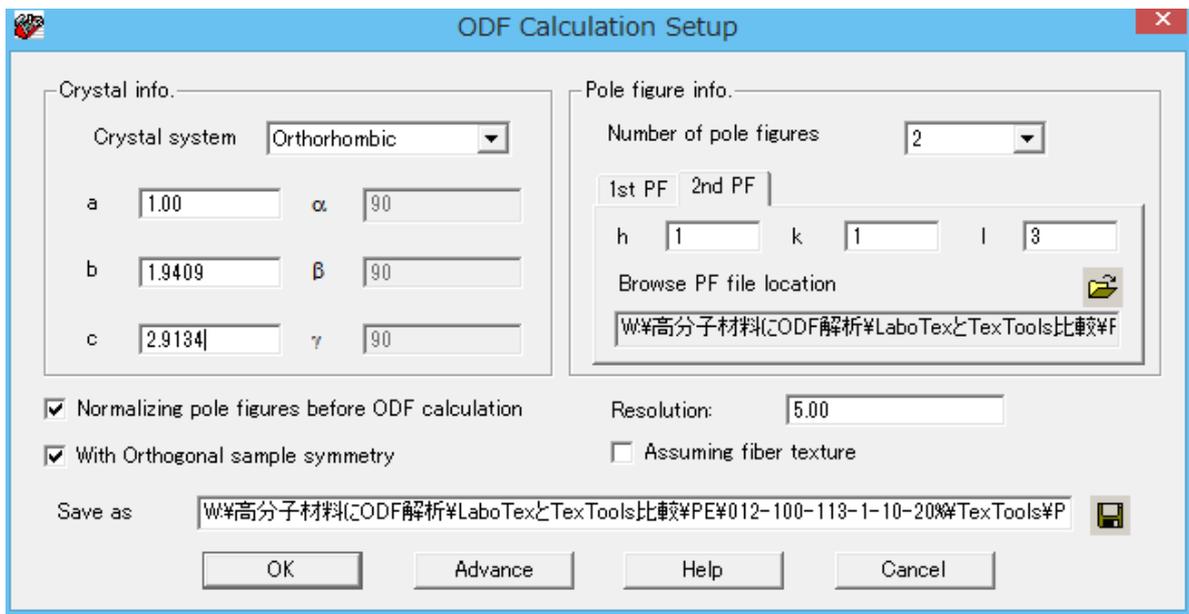
| | | | | | |
|---------|-------|------|------|-------|------|
| [0 7 6] | 37.11 | 90.0 | 25.5 | 37.11 | 0.0 |
| [7 2 2] | 50.0 | 25.0 | 9.0 | 50.0 | 65.0 |



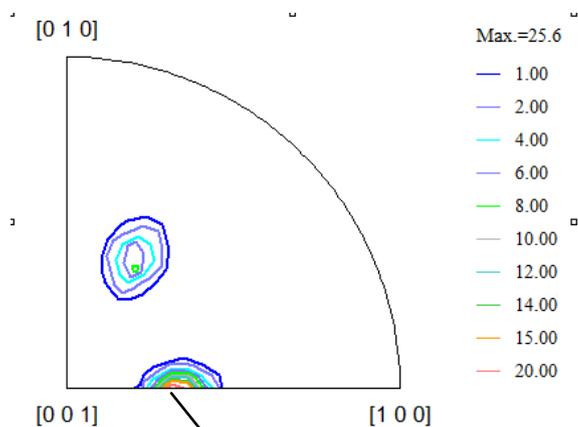
InverseDisplayXY では
 逆極点軸[001]-[100]-[010]を
 [100]-[010]-[100]に変更しています。
 例えば、
 本来の表示では底辺は[001]-[100]であるが、
 この底辺に[076]が存在する事が奇異で
 底辺を[001]-[010]に変更しています。

012-100-113-1-10-20-Inverse.TPF ND_Max=25.5

再計算極点図をL a b o T e x の指数で無理やりT e x T o o l s による計算

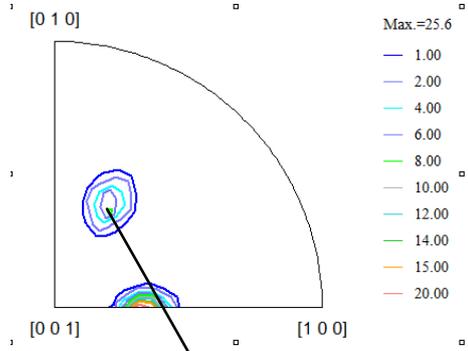
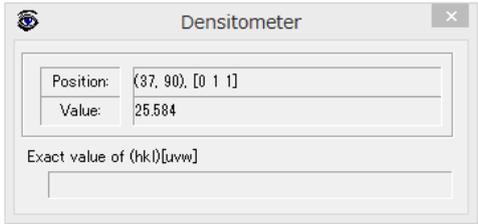


TexTools は、Direction で計算される



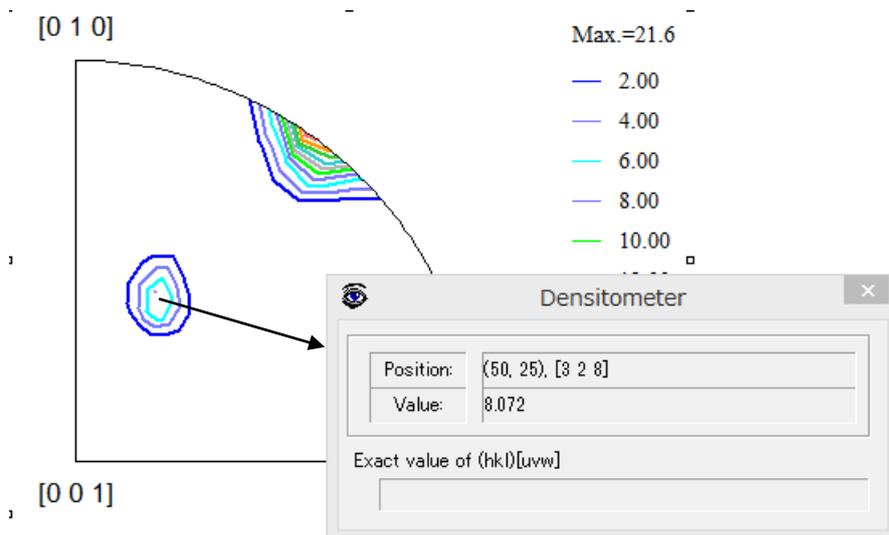
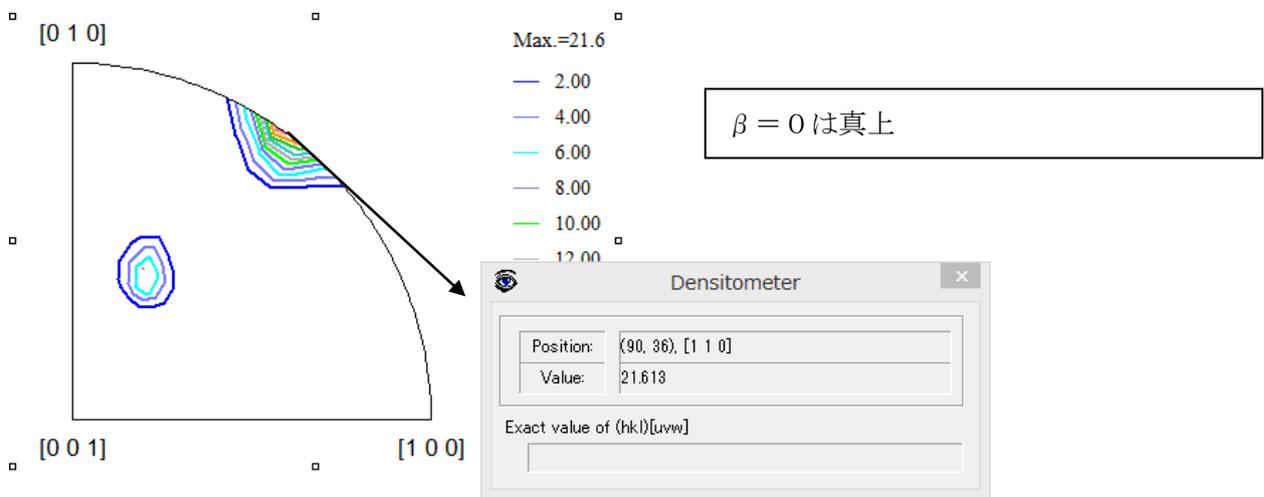
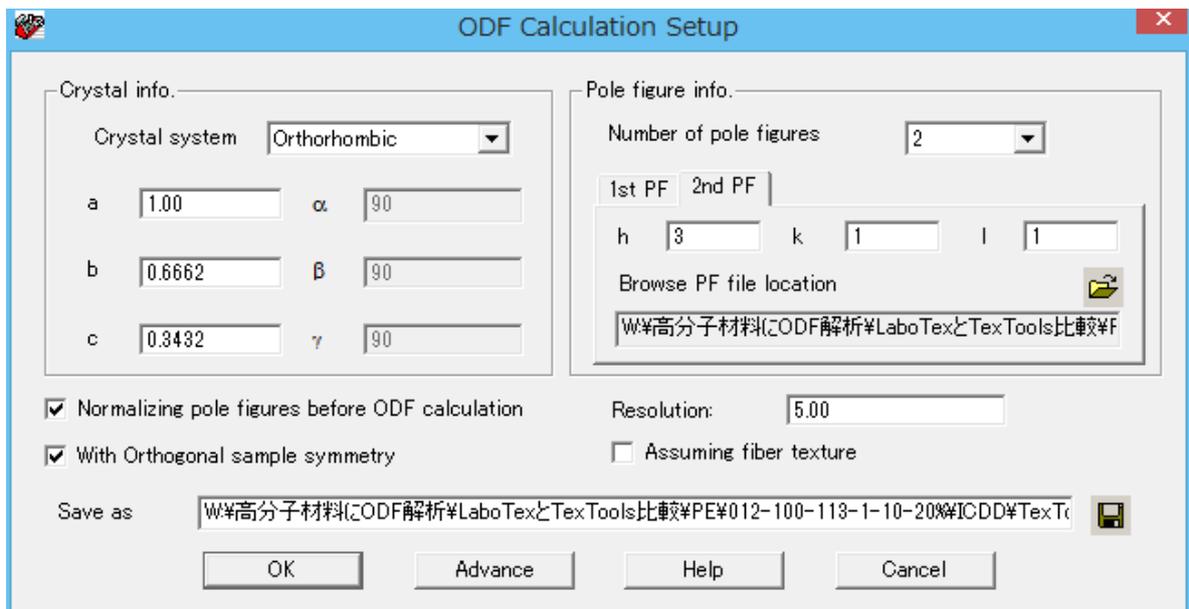
$\beta = 0$ は真上

TexTools の底辺は
[001]-[100]で表示されています
しかしながら $\beta = 90$
 β は[100]からの角度と考えると???



GPInverseDisplay の Direction とほぼ同一の結果になる。

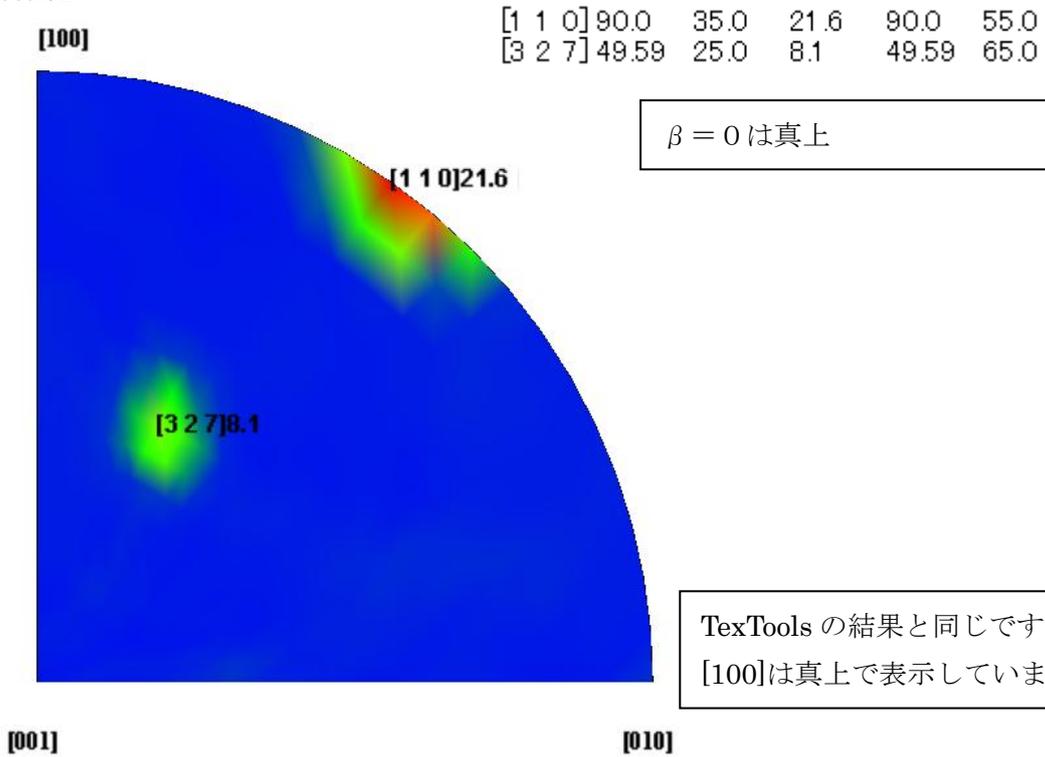
TexToolsでICDDの格子定数で計算する



逆極点図が、LaboTexと異なります。

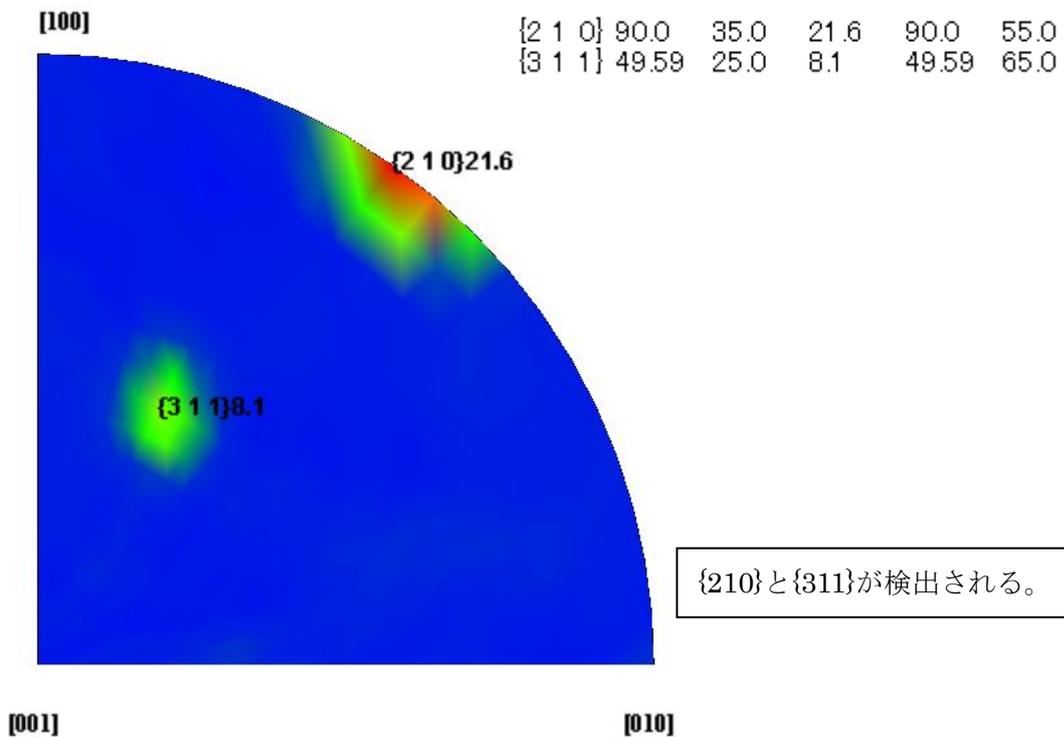
TexToolsによるICDD格子定数の逆極点をGPIInverseDisplayで計算

Direction



ND.HIPF_Max=21.6

Plane



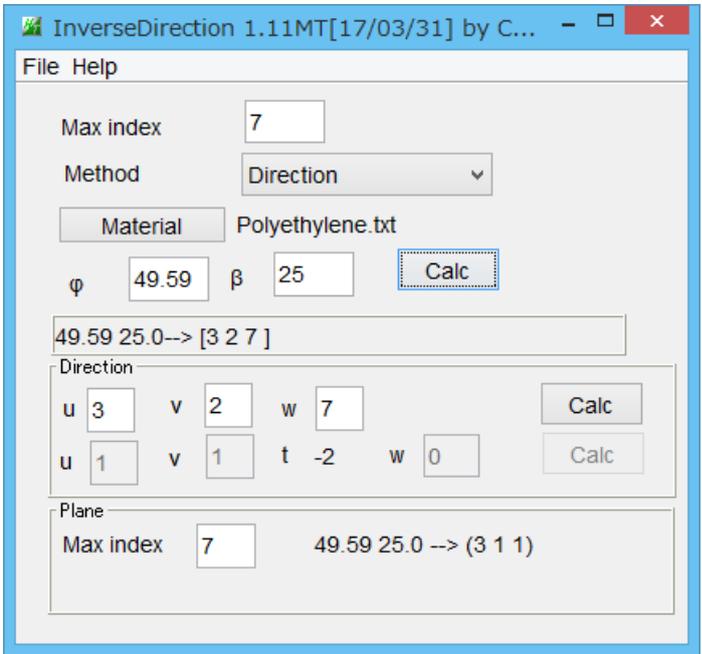
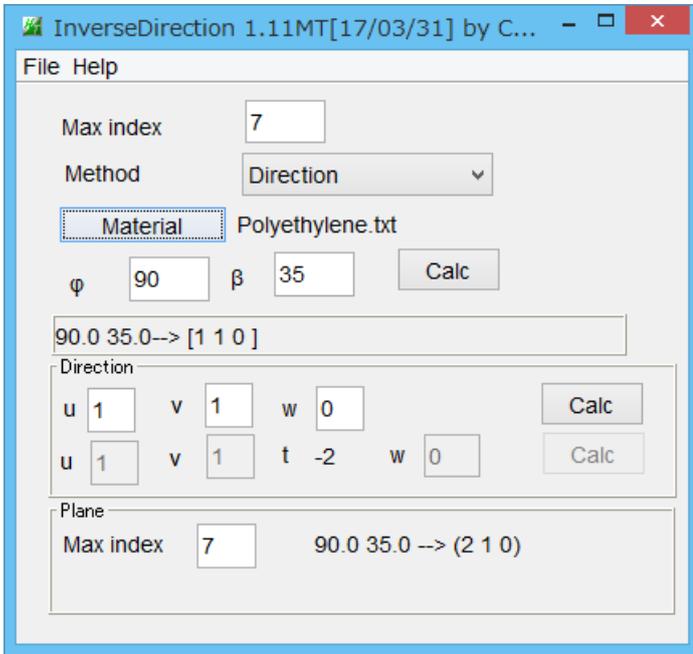
ND.HIPF_Max=21.6

InverseDirectionで動作確認

I CDDタイプ a b c α β γ

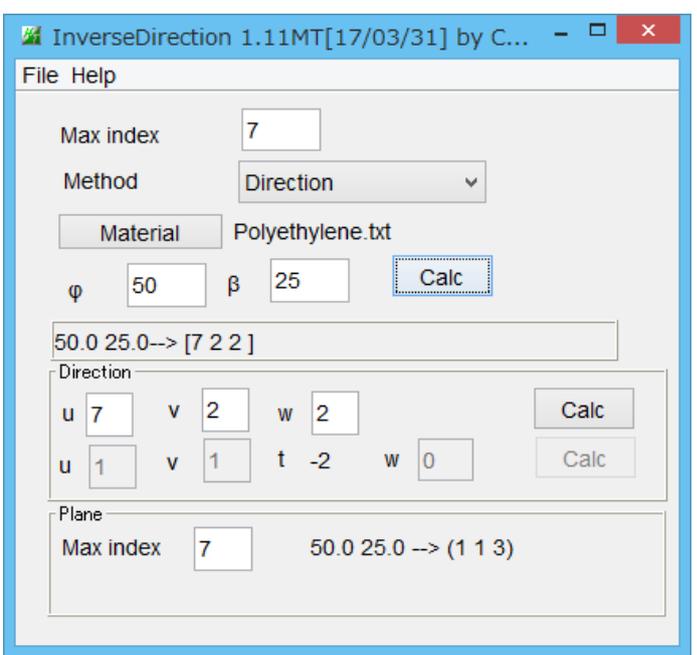
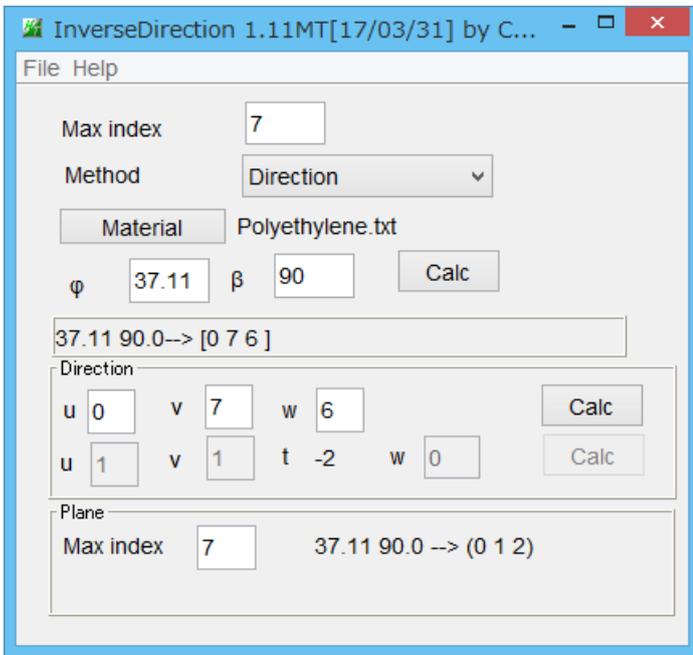
$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ 90.0 35.0 21.6 90.0 55.0
 $\begin{bmatrix} 3 & 2 & 7 \end{bmatrix}$ 49.59 25.0 8.1 49.59 65.0

β = 0 は真上



L a b o T e xタイプ a b c α β γ

$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$ 37.11 90.0 25.5 37.11 0.0
 $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 3 \end{bmatrix}$ 50.0 25.0 9.0 50.0 65.0

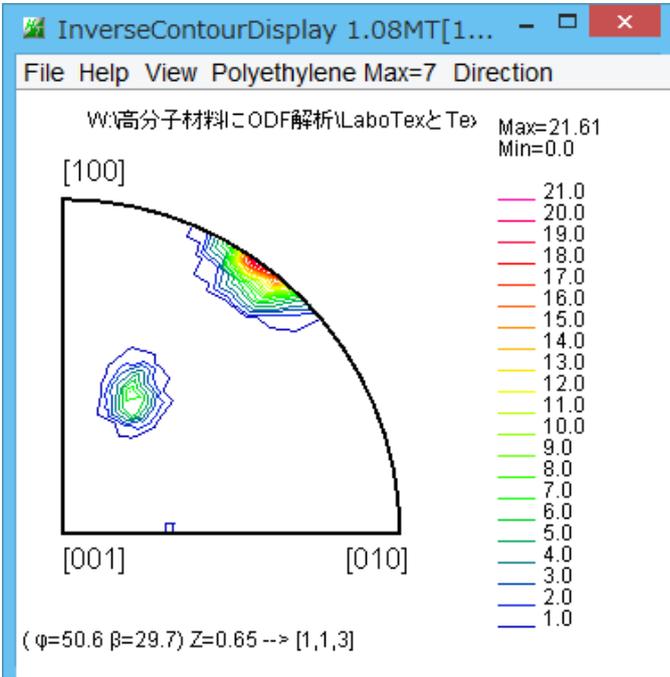
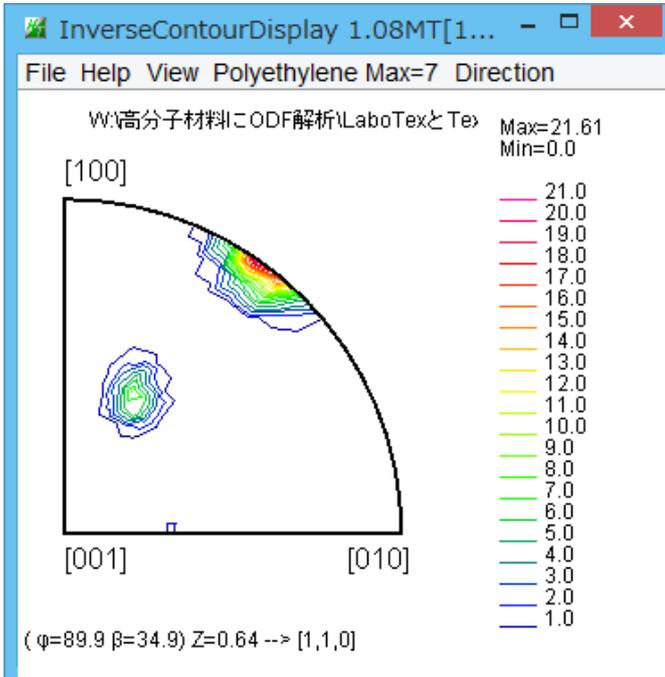


InverseCounterDisplay (GPInverseDisplayで使用) で確認

I CDDタイプ a b c α β γ

$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 7 \end{bmatrix} \begin{matrix} 90.0 & 35.0 & 21.6 \\ 49.59 & 25.0 & 8.1 \end{matrix} \begin{matrix} 90.0 & 55.0 \\ 49.59 & 65.0 \end{matrix}$

$\beta = 0$ は真上



L a b o T e xタイプ a b c α β γ

$\begin{bmatrix} 0 & 7 & 6 \\ 7 & 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{matrix} 37.11 & 90.0 & 25.5 \\ 50.0 & 25.0 & 9.0 \end{matrix} \begin{matrix} 37.11 & 0.0 \\ 50.0 & 65.0 \end{matrix}$

