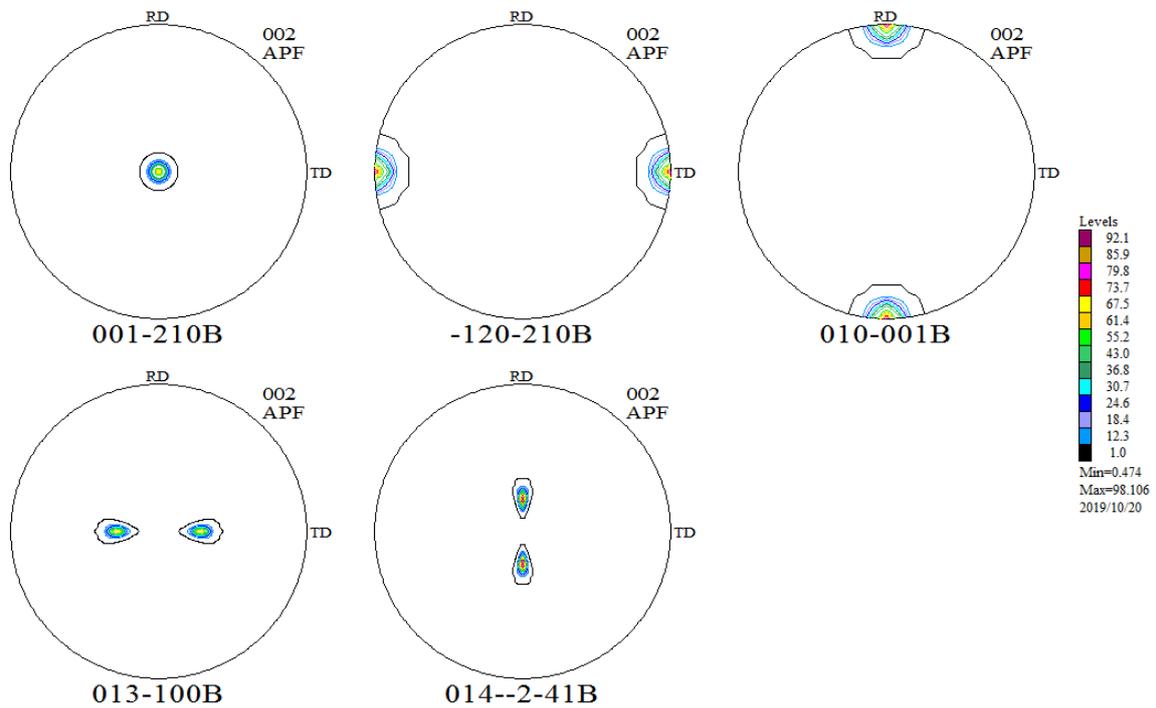


## チタン合金の主要方位をシュミレーション

LaboTexのシュミレーションを使用しチタン合金の主要方位 ODF 図を作成。  
ODF図から極点図、逆極点図を作成し、Exportし  
ODF図、極点図、逆極点図の整合性をチェックする。

シュミレーションした各方位の {002} 極点図



2019年10月20日

*HelperTex Office*

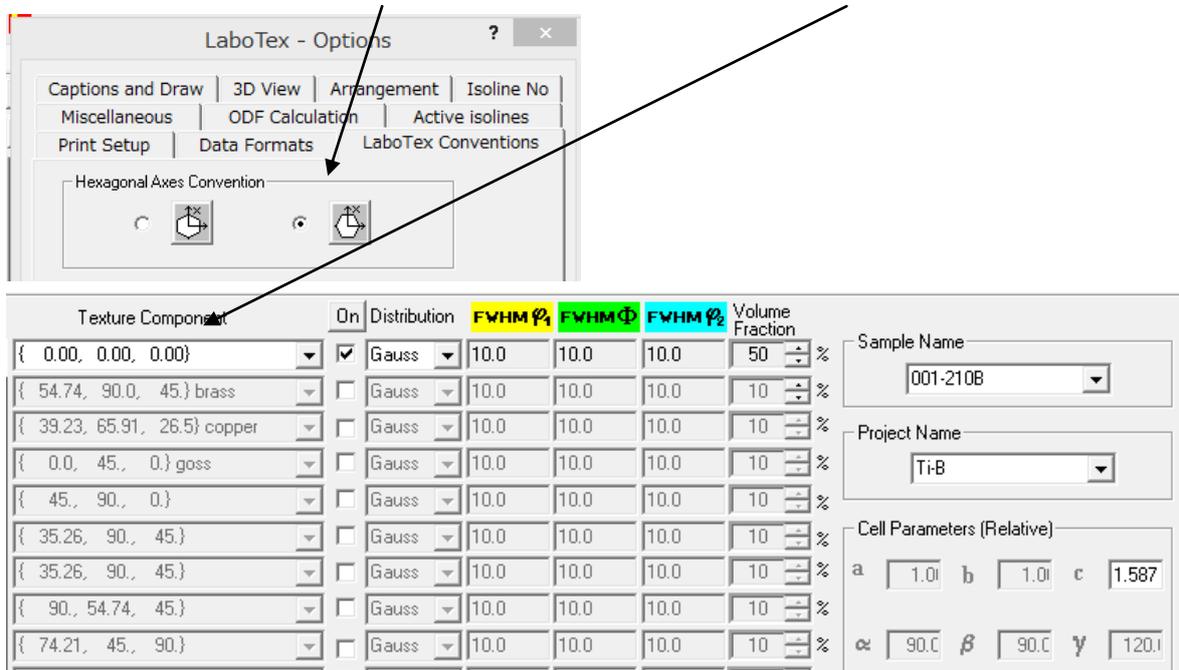
## 1. 概要

Hexagonalでは、Ti, Mgが扱われる。

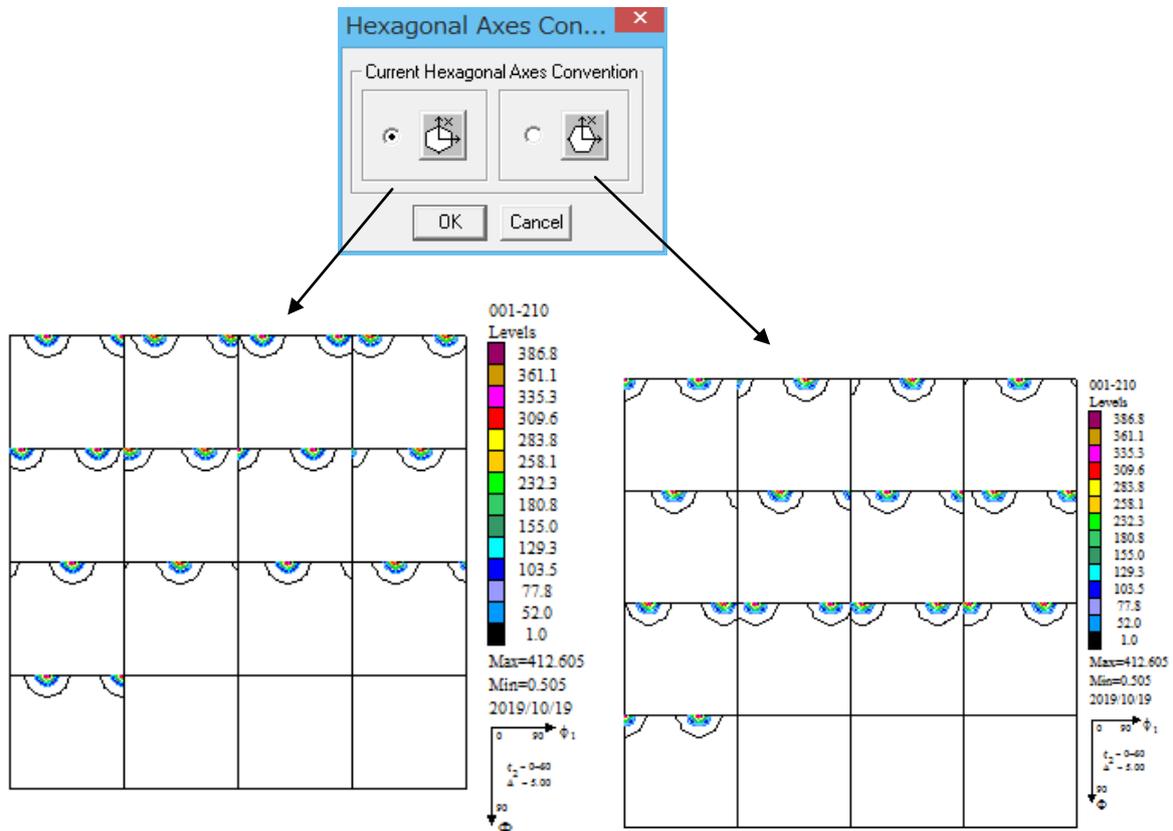
Tiの主要方位をLaboTexで計算し、3指数から4指数に変えて表示してみます。

## 2. LaboTexでは、ODFのModeling機能があります。

予め、Option画面でB-Type (BType X=[10-10]) を選択しEuler角度で入力する。



又、ODF表示では、X軸を選択表示できます。

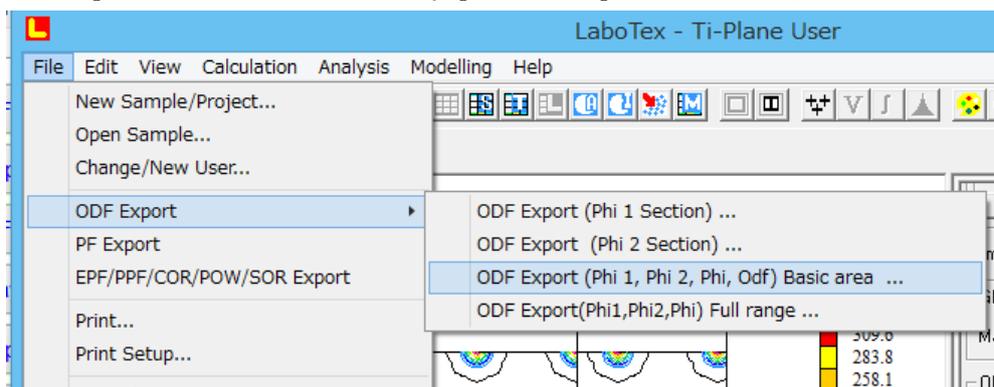


左をA-Type、右をB-Typeとして扱います。

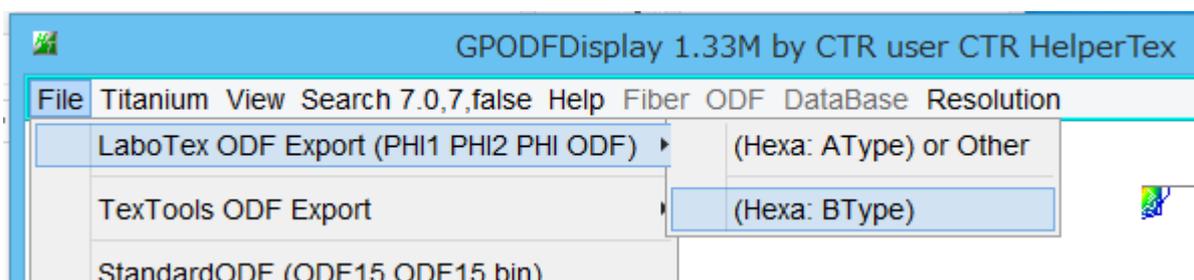
入力はEuler角度からODF図を作成

以下で右側のX軸を[10-10]として扱います。

3. ODF図を4指数で扱うため、ODF図をE X p o r t し、CTRソフトウェアで表示します。  
ODF図をE x p o r tする場合、B-T y p eでE x p o r tします。



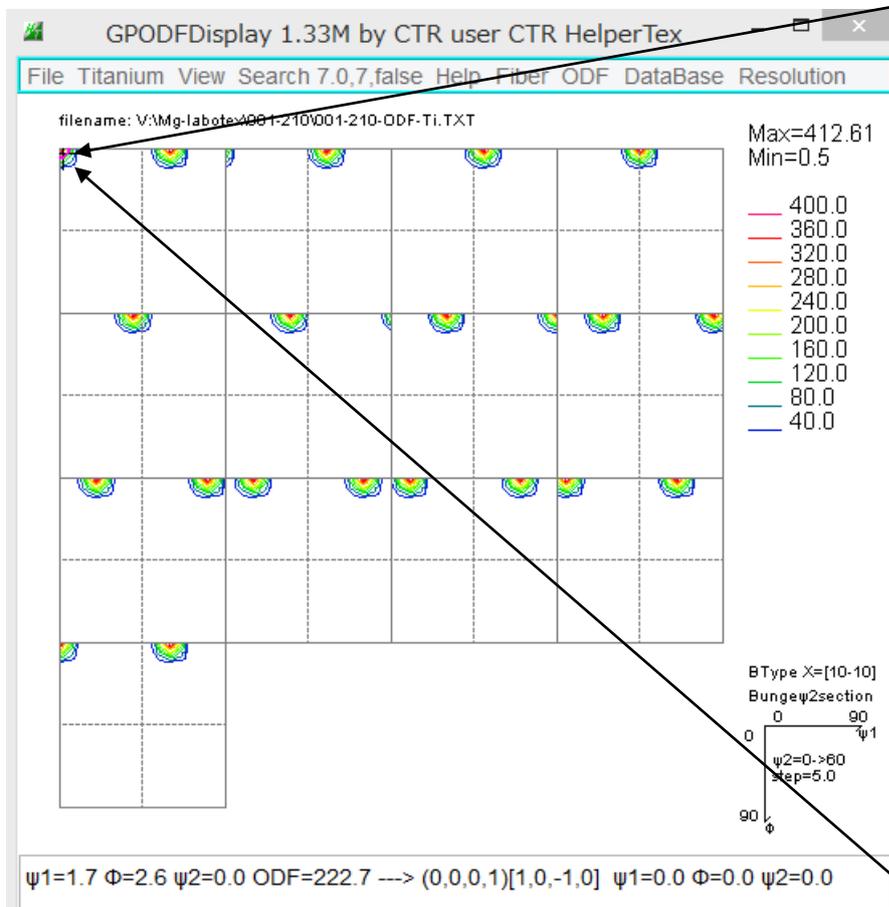
G P O D F D i s p l a yでB-T y p eを扱う場合



B-T y p eとして読み込みます。

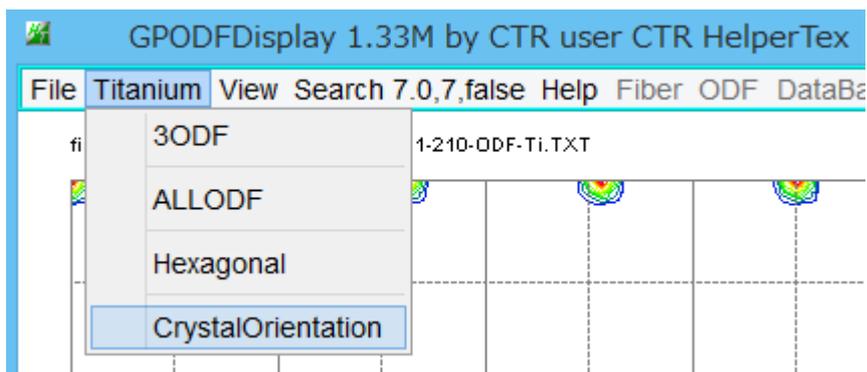
G P O D F D i s p l a yで方位計算

ODF 図上をマウス移動で方位計算し、クリック位置を+、計算方位位置を○で表示

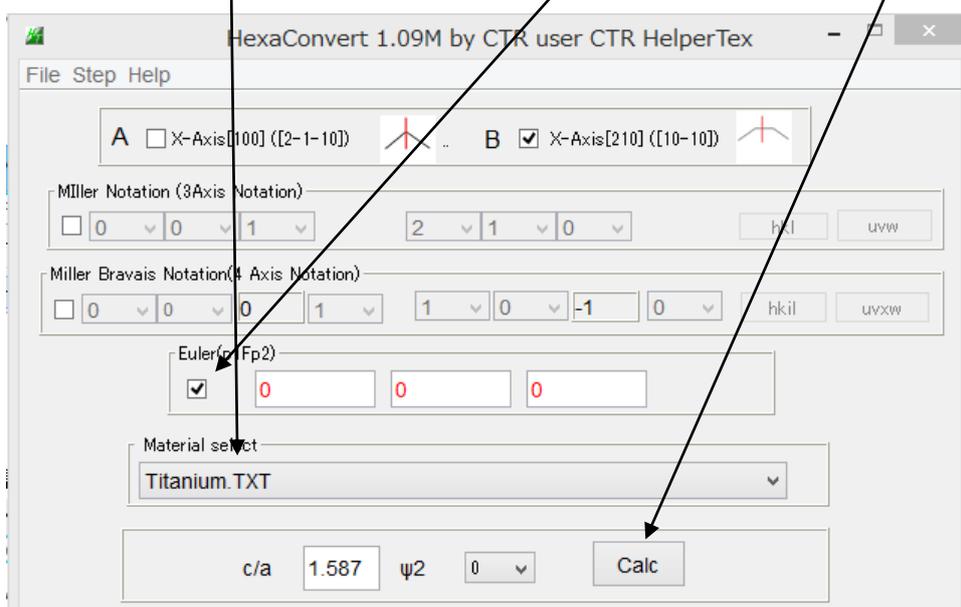


$\psi = 0$ 、 $\Phi = 0$ 、 $\phi = 0$ とする場合、マウス分解能などで  $\{0, 0, 0\}$  など正確に選択が難しい場合

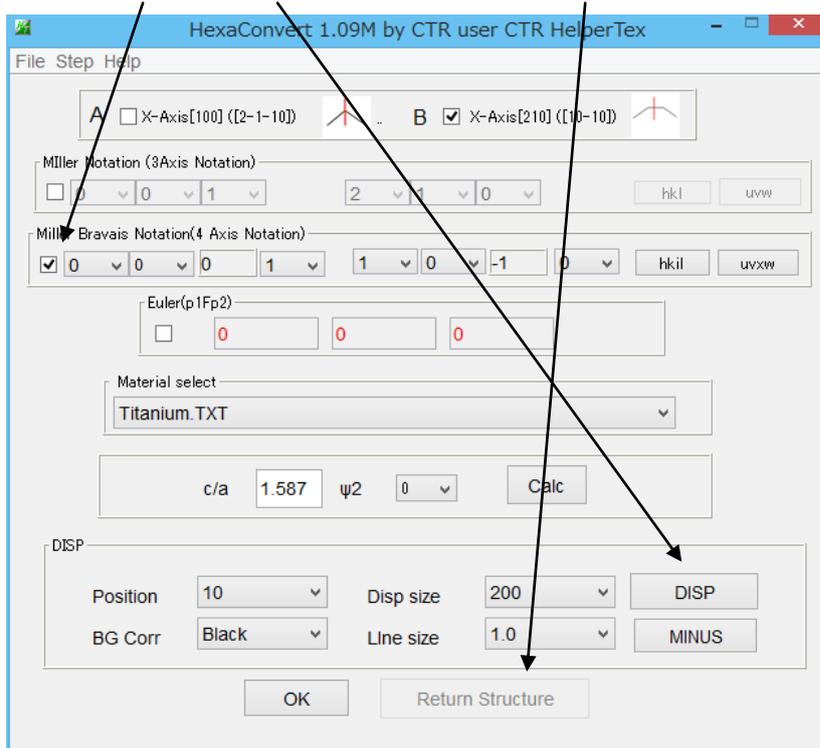
表示しているφ2画面上をマウスクリックで+○を消し、Titaniumをクリック  
CrystalOrientationを表示



Titaniumを選択、Euler角度(0, 0, 0)を入力でcalc

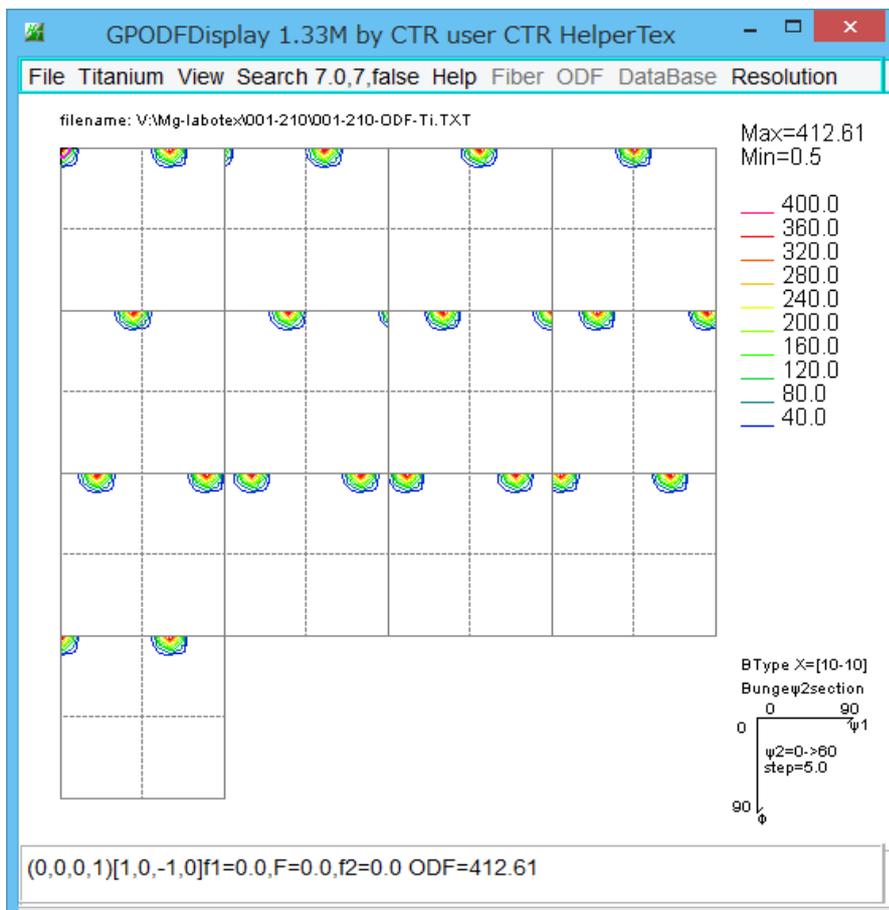


4指数を選択、Disp、Return Structure



ODF図上にEuler角度(0, 0, 0)を表示します。

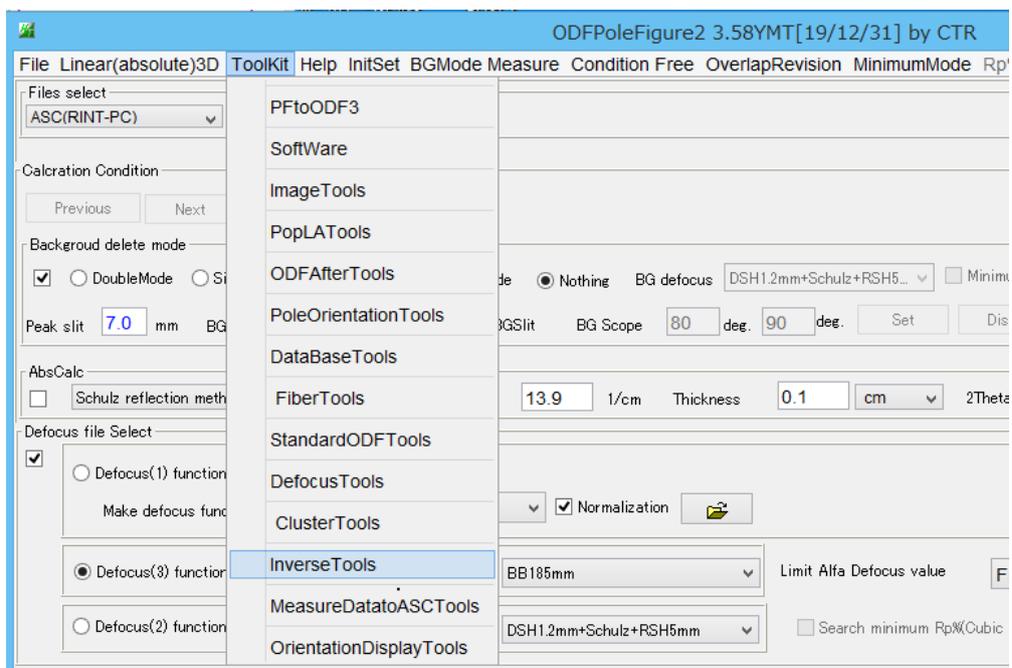
計算の場合、マウスクリックの+表示なし、計算の○表示のみになります。



## 5. 逆極点図表示と方位の決定

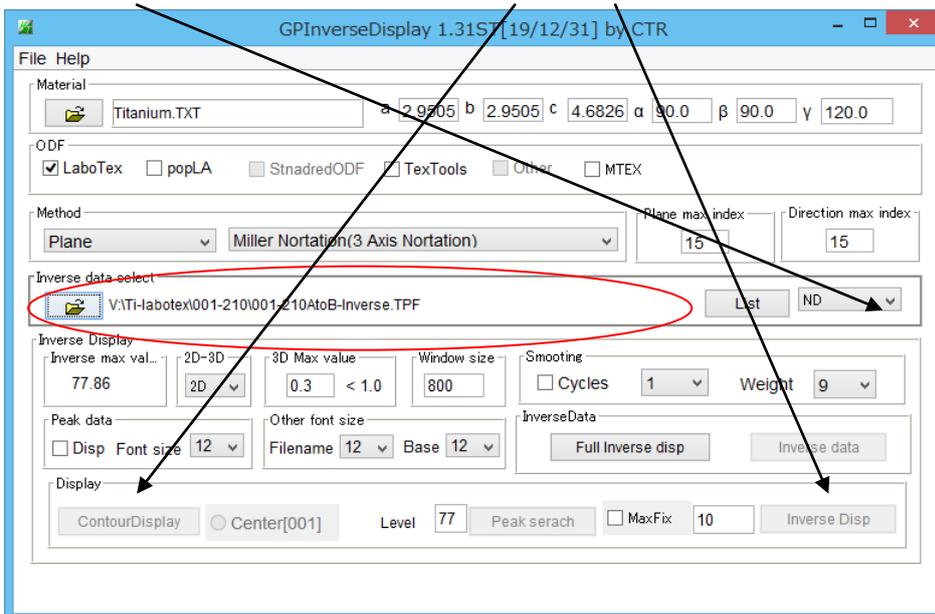
LaboTex de 計算した逆極点図を Export し、CTR で扱う。

InverseTools の GPInverseDisplay を使用





ND-RD の方向を決定 逆極点図は Contour と 3 D を表示



3 指数の P l a n e では

Method  
Plane Miller Notation(3 Axis Notation)

Peaksearch

{0 0 1} 0.0 30.0 77.86 0.0 0.0

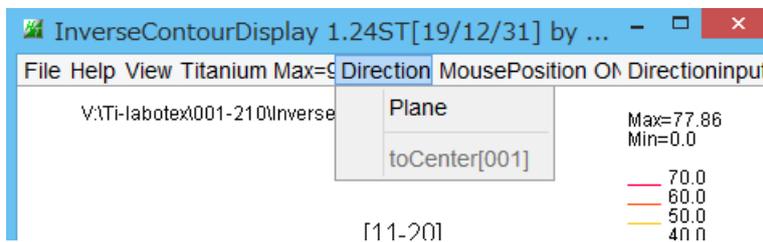
4 指数の D i r e c t i o n では

Method  
Direction Miller-Bravais Notation(4 Axis Notation)

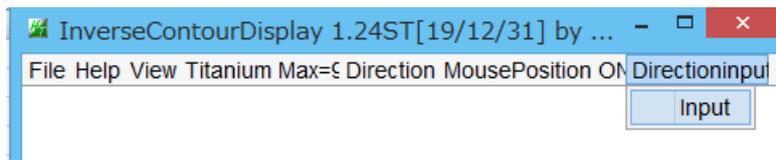
PeakSearch

[0 0 0 1] 0.0 30.0 77.86 0.0 0.0

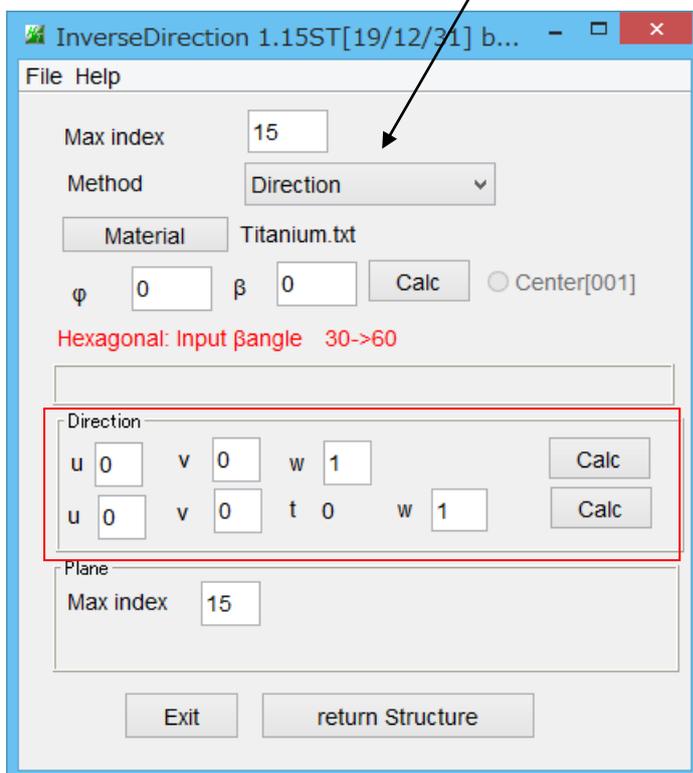
Contour の場合、マウス指定の Plane<->Direction は



直接、数値入力の場合



P l a n e <-> D i r e c t i o n



3 指数<-> 4 指数

これらの機能を使って説明します。

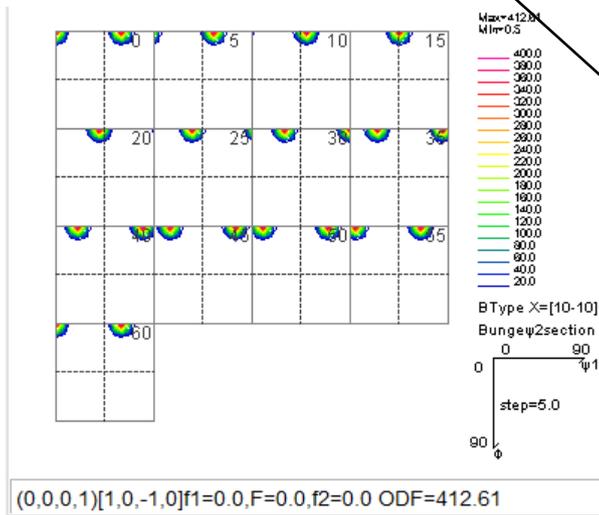
6.  $\{0001\} \langle 10-10 \rangle$   $\{001\} \langle 210 \rangle$

Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\phi_2$	FWHM $\phi_3$	Volume Fraction
$\{000, 000, 000\}$	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	50 %
$\{54.74, 90.0, 45.\}$ brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
$\{39.23, 65.91, 26.5\}$ copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
$\{0.0, 45., 0.\}$ goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
$\{45., 90., 0.\}$	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
$\{35.26, 90., 45.\}$	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
$\{35.26, 90., 45.\}$	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
$\{90., 54.74, 45.\}$	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
$\{74.21, 45., 90.\}$	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Sample Name: 001-210B

Project Name: Ti-B

Cell Parameters (Relative):  
 a: 1.0i b: 1.0i c: 1.587  
 $\alpha$ : 90.0  $\beta$ : 90.0  $\gamma$ : 120.0



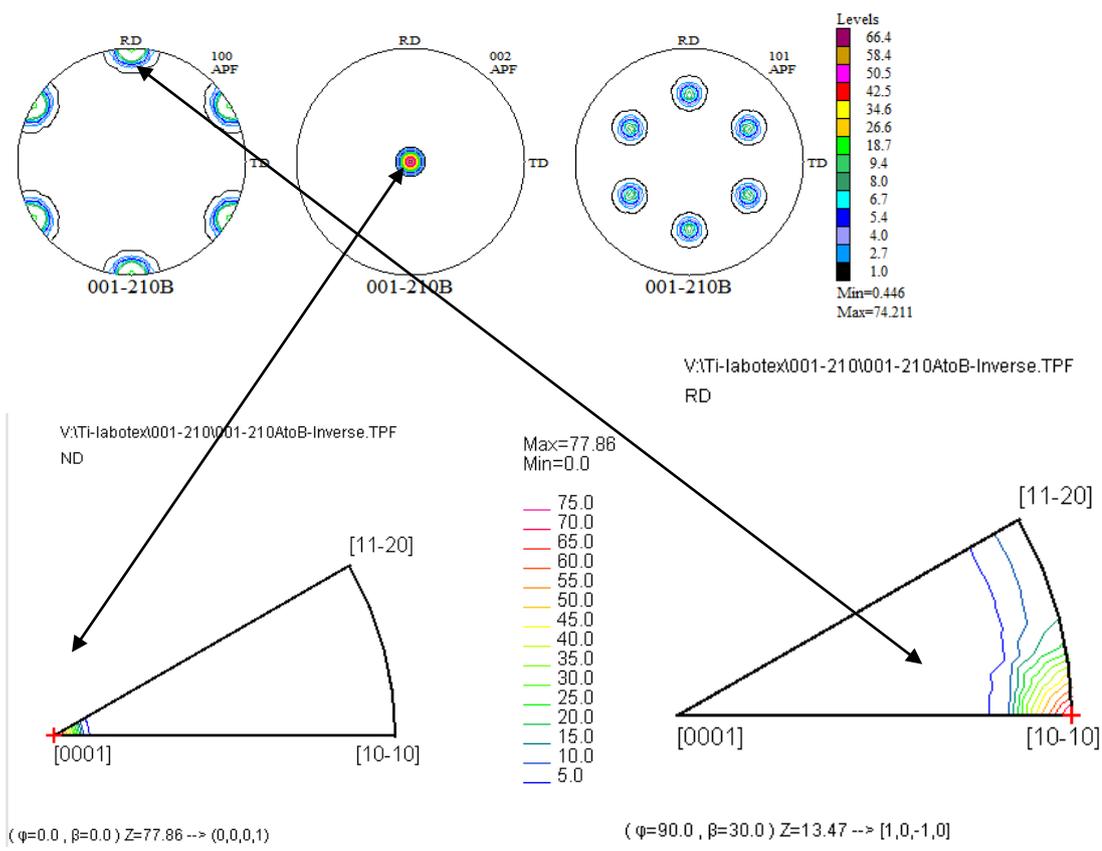
A  X-Axis[100] ([2-1-10]) B  X-Axis[210] ([10-10])

Miller Notation (3Axis Notation):  
 0  0  1  2  1  0

Miller Bravais Notation (4 Axis Notation):  
 0  0  0  1  1  0  -1  0

Euler(p1|p2):  
 0.0  0.0  0.0

Material select: Titanium.TXT



( $\phi=0.0, \beta=0.0$ ) Z=77.86  $\rightarrow$   $\{000, 000, 000\}$

( $\phi=90.0, \beta=30.0$ ) Z=13.47  $\rightarrow$   $\{1, 0, -1, 0\}$

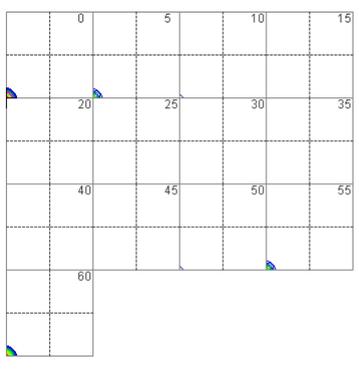
$$7. \{-1\ 2\ -1\ 0\} \langle 1\ 0\ -1\ 0 \rangle \quad \{-1\ 2\ 0\} \langle 2\ 1\ 0 \rangle$$

Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\phi_2$	FWHM $\phi_3$	Volume Fraction
{ 0.00, 90.00, 0.00}	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	50 %
{ 54.74, 90.0, 45.} brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 39.23, 65.91, 26.5} copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 0.0, 45., 0.} goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 45., 90., 0.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 35.26, 90., 45.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 35.26, 90., 45.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 90., 54.74, 45.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 74.21, 45., 90.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 15.23, 47.12, 68.20}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Sample Name: -120-210B

Project Name: Ti-B

Cell Parameters (Relative):  
 a: 1.0 | b: 1.0 | c: 1.587  
 $\alpha$ : 90.0 |  $\beta$ : 90.0 |  $\gamma$ : 120.0



(-1,2,-1,0)[1,0,-1,0]f1=0.0,F=90.0,f2=0.0 ODF=435.09

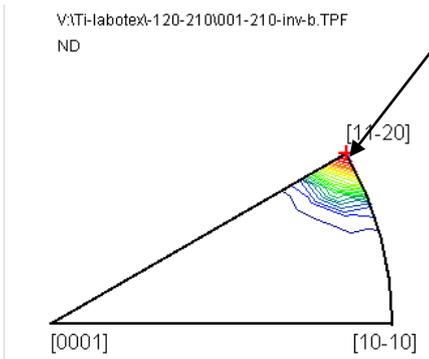
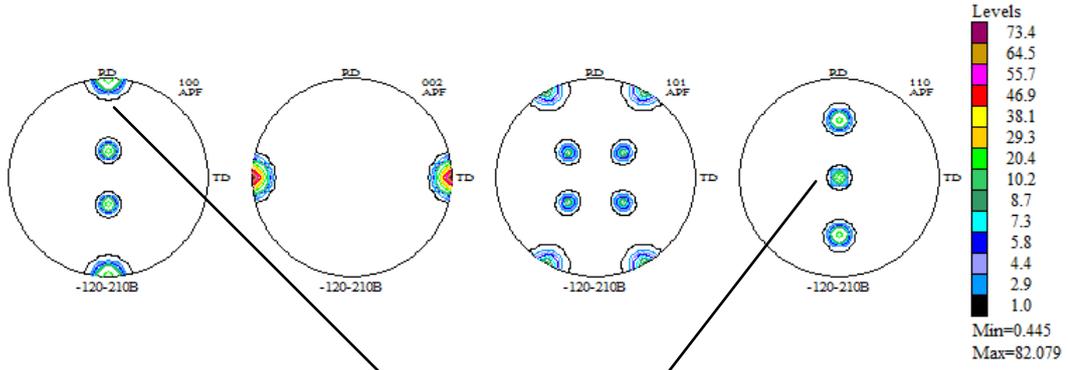
A  X-Axis[100] ([2-1-10])  B  X-Axis[210] ([10-10])

Miller Notation (3Axis Notation):  
 -1  2  0  2  1  0

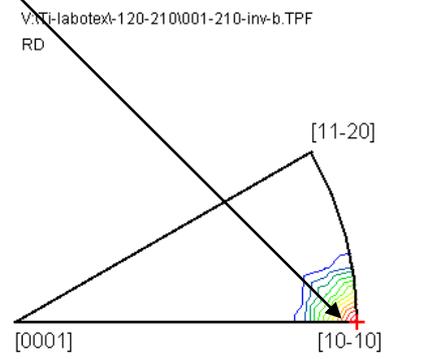
Miller Bravais Notation (4 Axis Notation):  
 -1  2  -1  0  1  0  -1  0

Euler(p|Fp2):  
 0 90 0

Material select: Titanium.TXT



( $\phi=90.0, \beta=60.0$ ) Z=27.7 --> (1,1,-2,0)



( $\phi=90.0, \beta=30.0$ ) Z=27.61 --> [1,0,-1,0]



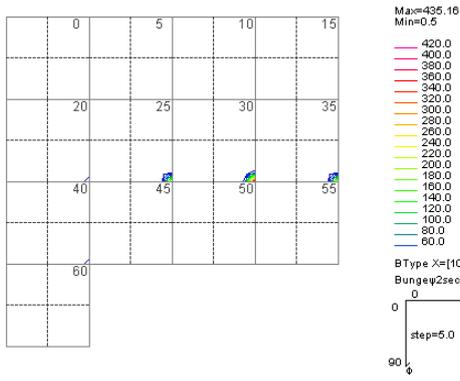
8.  $\{01\bar{1}0\} \langle 0001 \rangle \quad \{010\} \langle 001 \rangle$

Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\phi_2$	FWHM $\phi_3$	Volume Fraction
{ 90.00, 90.00, 30.00}	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	50 %
{ 54.74, 90.0, 45.} brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 39.23, 65.91, 26.5} copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 0.0, 45., 0.} goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 45., 90., 0.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 35.26, 90., 45.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 35.26, 90., 45.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 90., 54.74, 45.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 74.21, 45., 90.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 15.23, 47.12, 68.20}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Sample Name: 010-001B

Project Name: Ti-B

Cell Parameters (Relative):  
a: 1.00 b: 1.00 c: 1.587  
 $\alpha$ : 90.0  $\beta$ : 90.0  $\gamma$ : 120.1



$\{0,1,-1,0\}[0,0,0,1]f_1=90.0, f_2=30.0$  ODF=435.16

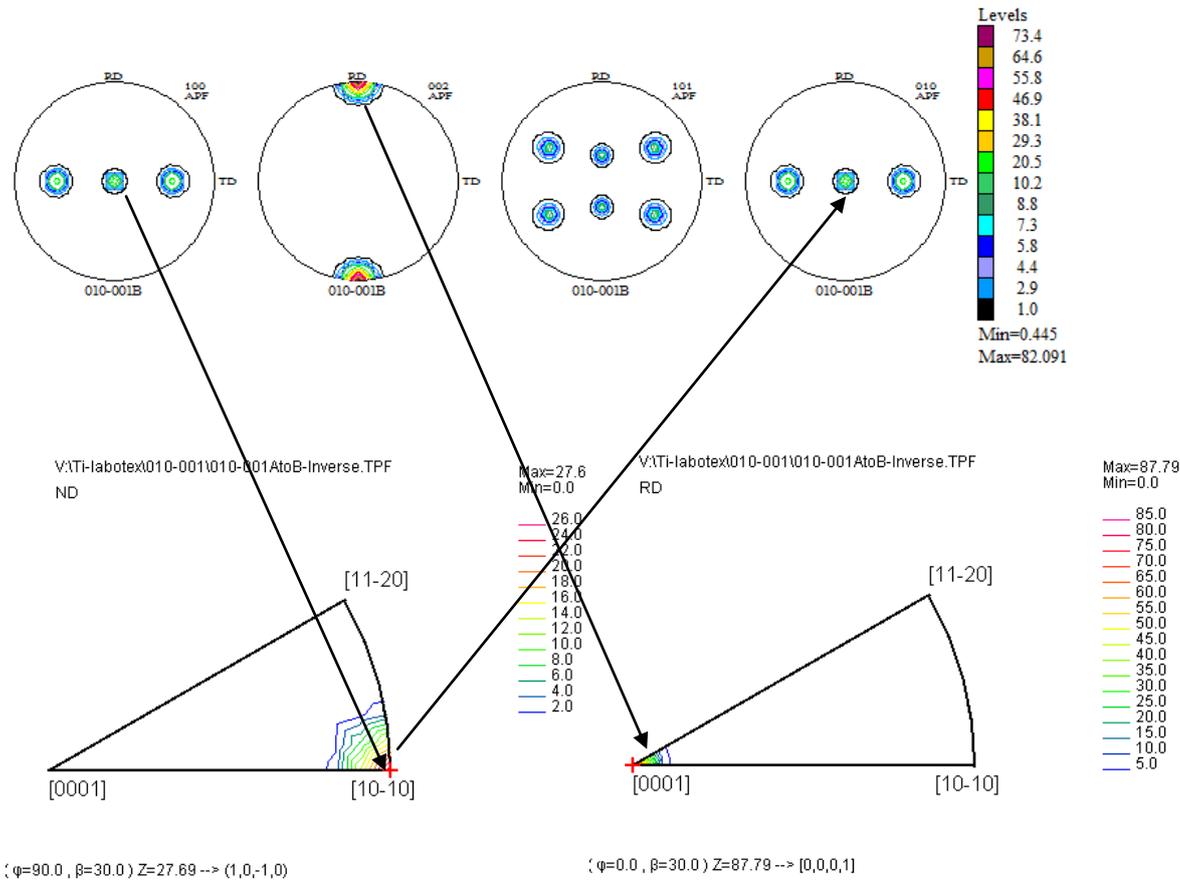
A  X-Axis[100] ([2-1-10])    B  X-Axis[210] ([10-10])

Miller Notation (3Axis Notation):  
 0  1  0    0 0 1    hkl    uvw

Miller Bravais Notation (4 Axis Notation):  
 0  1  -1  0    0 0 0 1    hkil    uvxw

Euler(p1|p2):  
 90.0    90.0    30.0

Material select: Titanium.TXT



$\{01\bar{1}0\} \langle 0001 \rangle$ に対し、ND 逆極点図は、(10-10)面で、(100),(010)が一致する。  
RD 逆極点図は、[0001]方向で[002]と一致する。

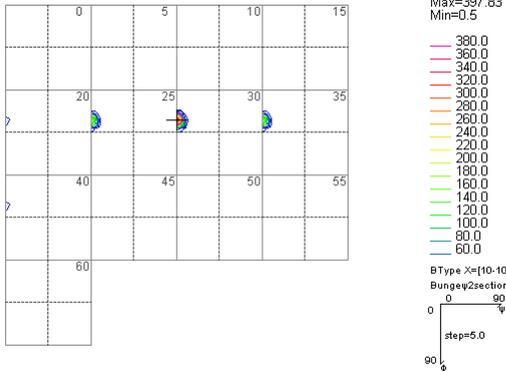
9.  $\{0\ 1\ -1\ 3\} <2\ -1\ -1\ 0> \{0\ 1\ 3\} <1\ 0\ 0>$

Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\phi_2$	FWHM $\phi_3$	Volume Fraction
{ 0.00, 31.40, 30.00}	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	50 %
{ 54.74, 90.0, 45.} brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 39.23, 65.91, 26.5} copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 0.0, 45., 0.} goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 45., 90., 0.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 35.26, 90., 45.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 35.26, 90., 45.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 90., 54.74, 45.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 74.21, 45., 90.}	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Sample Name: 013-100B

Project Name: Ti-B

Cell Parameters (Relative):  
 a: 1.00 b: 1.00 c: 1.587  
 $\alpha$ : 90.0  $\beta$ : 90.0  $\gamma$ : 120.0



$(0,1,3)[1,0,0]f_1=0.0, F=31.4, f_2=30.0$  ODF=397.83

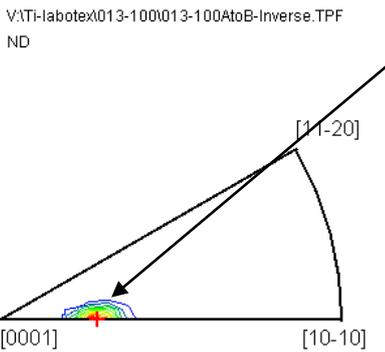
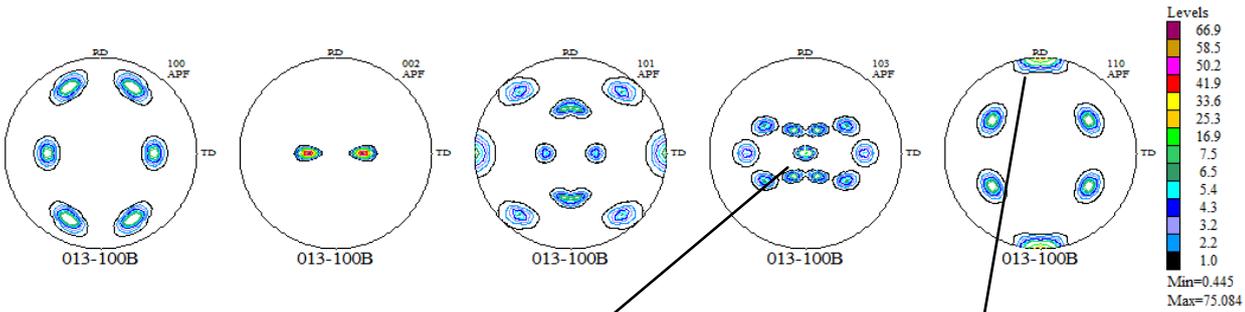
A  X-Axis[100]  $([2\ -1\ -10])$  B  X-Axis[210]  $([10\ -10])$

Miller Notation (3Axis Notation):  
 0  1  3  1  0  0

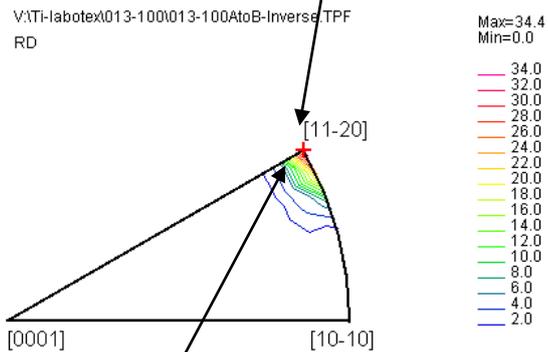
Miller Bravais Notation (4 Axis Notation):  
 0  1  -1  3  2  -1  -1  0

Euler( $\phi$ 1 $\phi$ 2):  
 0.0 31.418 30.0

Material select: Titanium.TXT



$(\phi=31.42, \beta=30.0) Z=25.37 \rightarrow (1,0,-1,3)$



$(\phi=90.0, \beta=60.0) Z=34.4 \rightarrow [1,1,-2,0]$

尚、

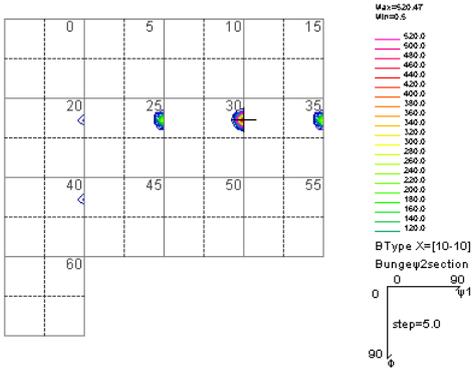
$90.0\ 0.0 \rightarrow [1\ 0\ 0] \rightarrow [2\ -1\ -10]$  は  $90.0\ 60.0 \rightarrow [1\ 1\ 0] \rightarrow [1\ 1\ -2\ 0]$  と同じ

$\{0\ 1\ -1\ 3\} <2\ -1\ -1\ 0>$  に対し、ND 逆極点は、 $(1\ 0\ -1\ 3)$  面で一致  
 RD 逆極点は、 $[11\ -20]$  方向であるが、 $[2\ -1\ -10]$  も同じ  
 逆極点図は、 $[11\ -20]$  は  $30 \rightarrow 60$ 、 $[2\ -1\ -10]$  は  $30 \rightarrow 0$  を表示で上図は平均値で表示しています。

1 0. { 0 1 - 1 4 } < 0 - 2 2 1 > { 0 1 4 } < - 2 - 4 1 >

Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\phi_2$	FWHM $\phi_3$	Volume Fraction
{ 90.00, 24.60, 30.00 }	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	50 %
{ 54.74, 90.0, 45. } brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 39.23, 65.91, 26.5 } copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 0.0, 45., 0. } goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 45., 90., 0. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 35.26, 90., 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 35.26, 90., 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 90., 54.74, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
{ 74.21, 45., 90. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Sample Name: 014--2-41B  
Project Name: Ti-B  
Cell Parameters (Relative): a: 1.0, b: 1.0, c: 1.587  
 $\alpha$ : 90.0,  $\beta$ : 90.0,  $\gamma$ : 120.0



A  X-Axis[100] ([2-1-10]) B  X-Axis[210] ([10-10])

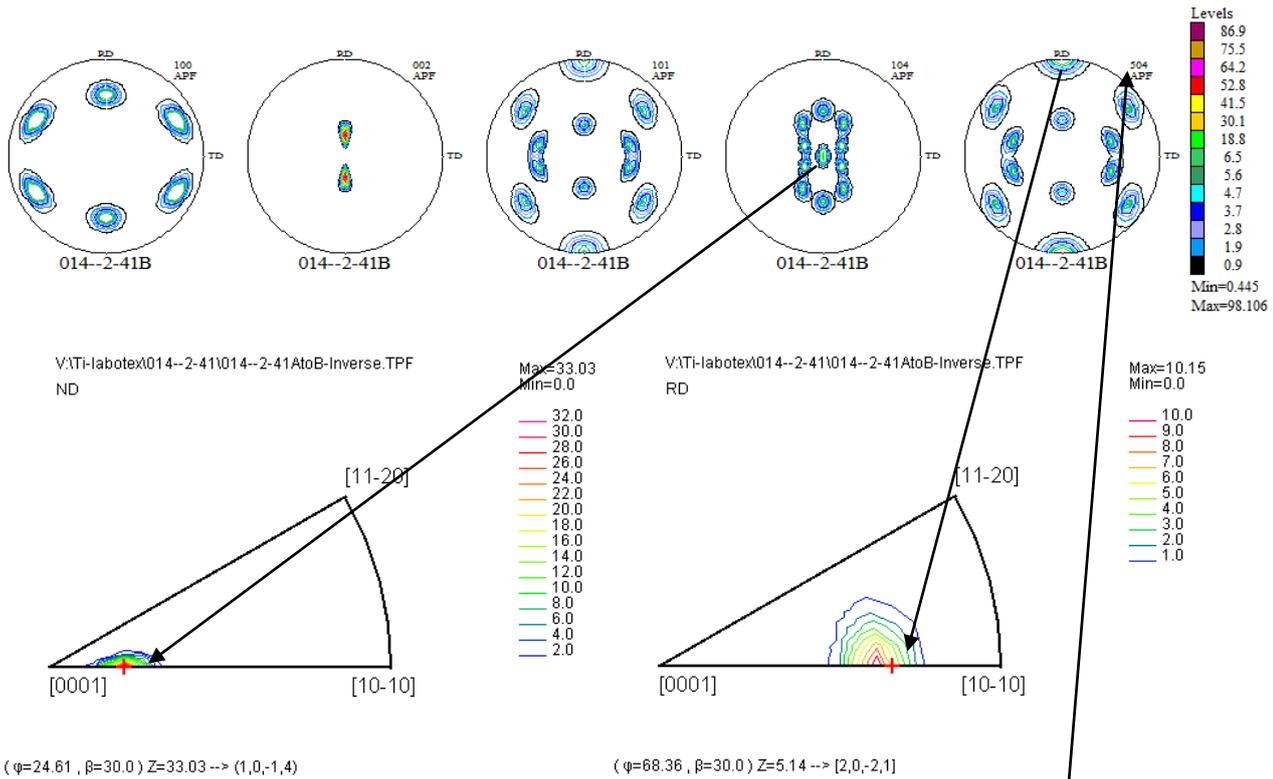
Miller Notation (3Axis Notation):  0 1 4 -2 -4 1 hkl uvw

Miller Bravais Notation (4 Axis Notation):  0 1 -1 4 0 -2 2 1 hkil uvxw

Euler(p1P2):  90.0 24.614 30.0

Material select: Titanium.TXT

(0,1,4)[-2,-4,1]f1=90.0,F=24.6,f2=30.0 ODF=520.47



Direction [20-21]に対する Plane は (11 0 -11 8) である 9 以内では (5 0 -5 4) が近い。{504} 極点図の RD とした

68.36 30.0 --> (11 0 8) --> (11 0 -11 8)

Plane: h 11 k 0 l 8

h 11 k 0 t -11 l 8

Direction: Max index 15 68.36 30.0 --> [4 2 1] 68.36 30.0 --> [2 0 -2 1]

最大密度位置にずれが発生

( $\phi=64.9$   $\beta=30.5$ ) Z=10.15 --> [3,0,-3,2]

次回扱います