

# CrystalOrientationDによる標準ステレオ投影描画法

CrystalOrientationDソフトウェアは単結晶方位の解析を目的に作成されている。

測定したデータの指数付けを行い、軸立データを計算する。

この機能により、方位を指定することで、他の方位計算も行えることから標準ステレオ投影も可能になる

CrystalOrientationDの機能で、極点図を作成し、方位解析を行い、BCCのND,RD,TD方向のSchmid因子計算も紹介します。

# CrystalOrientationDの機能

Blind:ピーク検出時、検出したピークの周辺にブラインドの設定(Blind-15)は15度

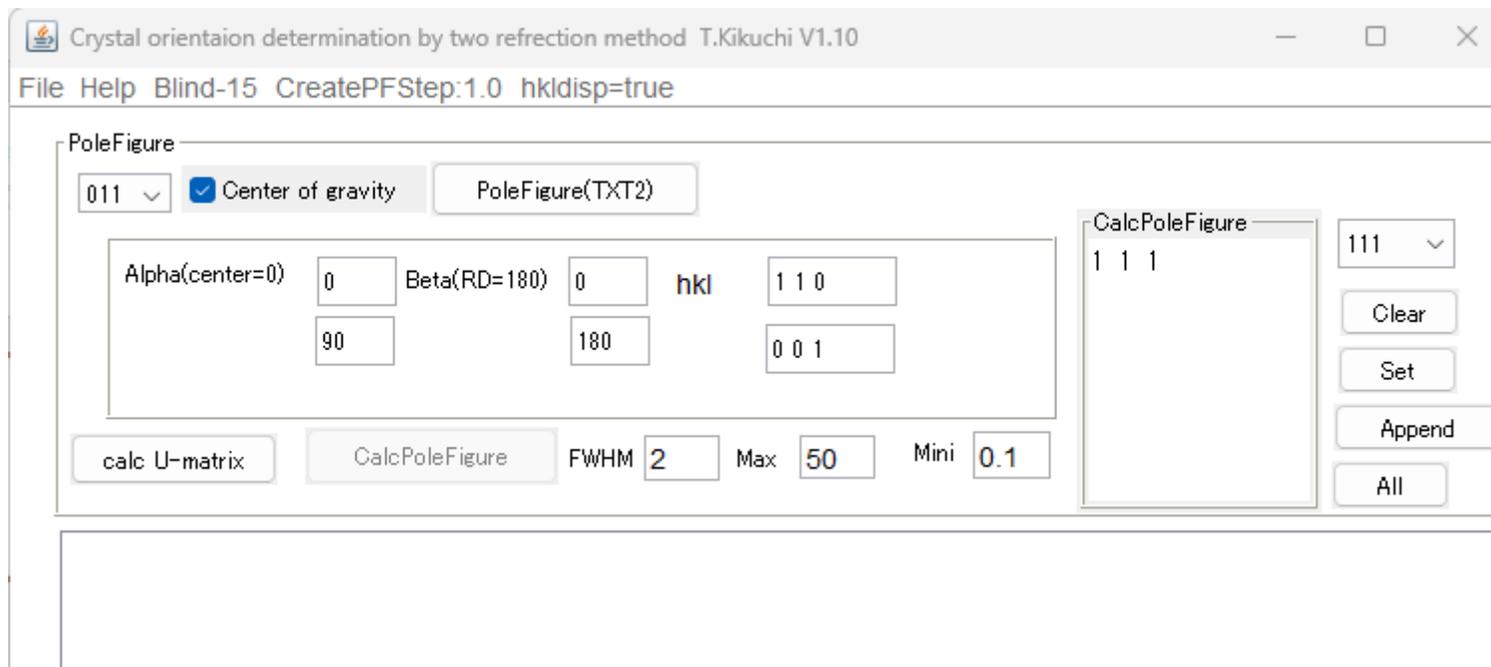
CreatePFStep:は作成する極点図のステップ間隔 :1.0は $\alpha$ 、 $\beta$ 共1deg間隔で作成される

hkldispは極点図上に指数を表示する指定

入力極点図は、{001},{011},{111},{112},{012},{123},極点図中心 $\alpha$ 角度は90度

データ手入力は、極点図の中心 $\alpha=0$ 、 $\beta$ は極点図の真下を0としてプラスマイナス180度以内で入力する。

予め、指数を選択し極点図を入力すると、計算から手入力部分データが計算され、表示される



calcU-matrixで手入力部分から取り付け方位を計算する。

CalcPoleFigureにより、CalcPoleFigureリストから極点図 ( $\alpha$ 、 $\beta$ ) が計算される

CalcPoleFigureをAllで指定すれば、標準ステレオ投影データが表示される

# 極点図解析手順

Crystal orientation determination by two refraction method T.Kikuchi V1.10

File Help Blind-15 CreatePFStep:1.0 hkl disp=true

PoleFigure

011  Center of gravity PoleFigure(TXT2) L:\DATA\Stereo\copper\Rotation\110\_15labotexCCW-rpR30T30N0\_2...

Alpha(center=0) 30.01 Beta(RD=180) 78.012 hkl 1 1 0  
 32.992 32.998 0 1 -1

Calc PoleFigure 011  
 -1 1 0  
 -1 0 1  
 0 -1 1  
 1 -1 0  
 1 0 -1  
 -1 -1 0

calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM 2 Max 50 Mini 0.1

L:\DATA\Stereo\copper\Rotation\110\_15labotexCCW-rpR30T30N0\_2.TXT peaksearch by center of gravity  
 L:\DATA\Stereo\copper\Rotation\110\_15labotexCCW-rpR30T30N0\_2.TXT peaksearchCenter chiangle=0 phiangle:

chiangle	phiangle	Center=90	
30.01	-178.01	59.99	1.988
32.99	-33.0	57.01	147.002
64.99	-106.0	25.01	74.003

indexing(Center=0,RD=180->0)

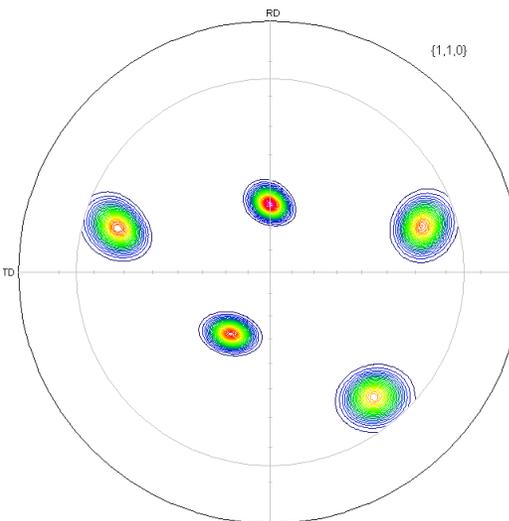
30.01	-178.01	1 1 0
32.99	-33.0	0 1 -1
64.99	-106.0	1 0 -1

sartdelete: (1 1 0),(0 1 -1) --> (1 0 -1) 0.54

CalcPoleFigure

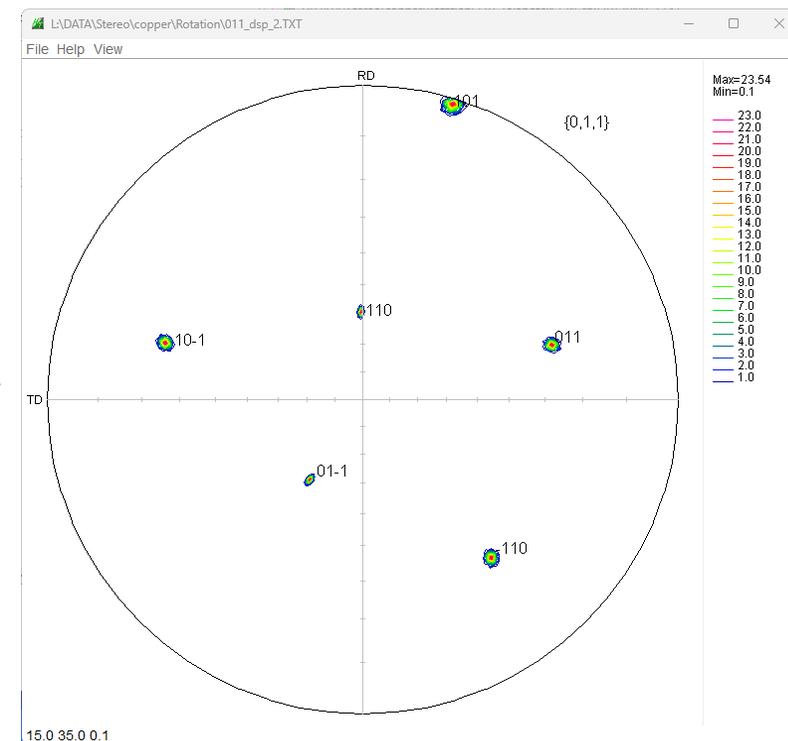
Direction	Alpha	Beta	Center=90	
1 1 0	30.01	-178.01	59.99	1.988
0 1 1	63.52	106.73	26.48	286.727
1 0 1	88.33	163.75	1.67	343.747
0 1 -1	33.19	-32.87	56.81	147.129
-1 1 0	85.37	39.44	24.83	219.44
1 0 -1	65.16	-105.48	24.84	74.519

Initialize File

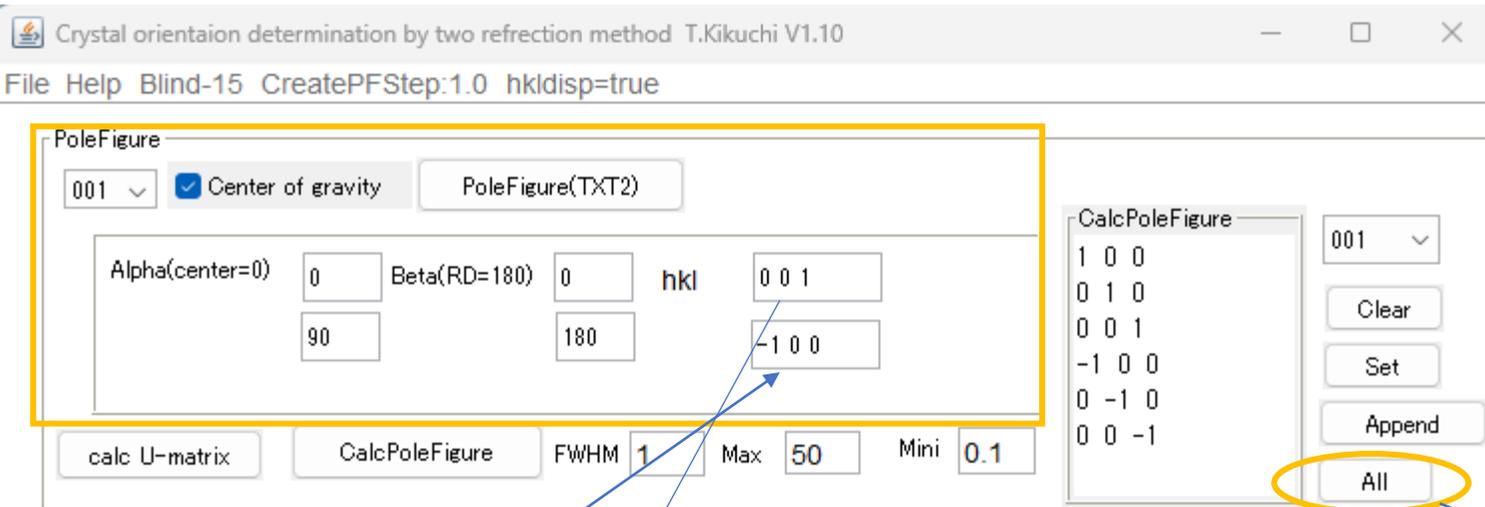


極点図入力すると  
 指数付け結果を手入力部  
 分へ表示

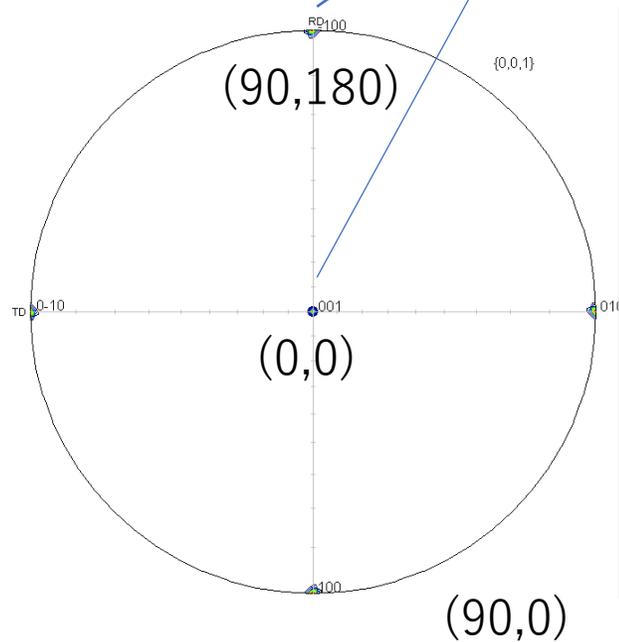
指定した方位の計算を  
 手入力部分のデータから  
 計算し極点図に描画



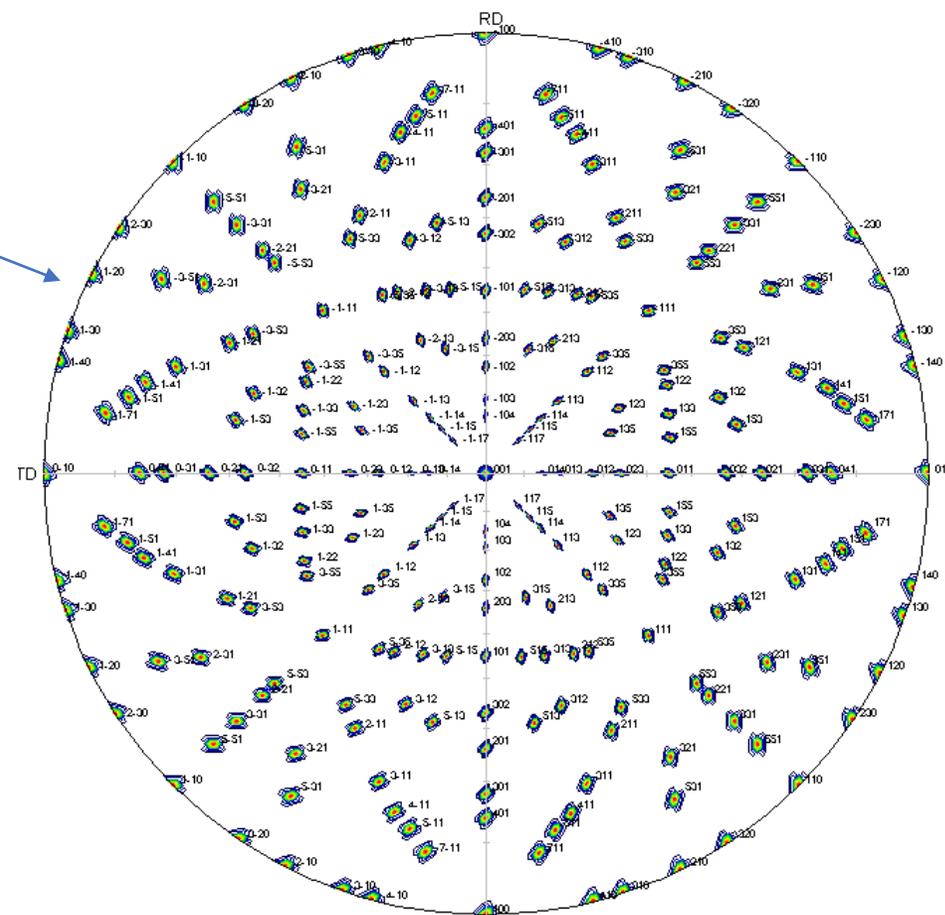
# (001)標準ステレオ投影図描画



All->CalcPoleFigure



極点図の回転は、  
RD方向の値を変更する



# (011)標準ステレオ投影図描画

Crystal orientation determination by two refraction method T.Kikuchi V1.10

File Help Blind-15 CreatePFStep:1.0 hkl disp=true

PoleFigure

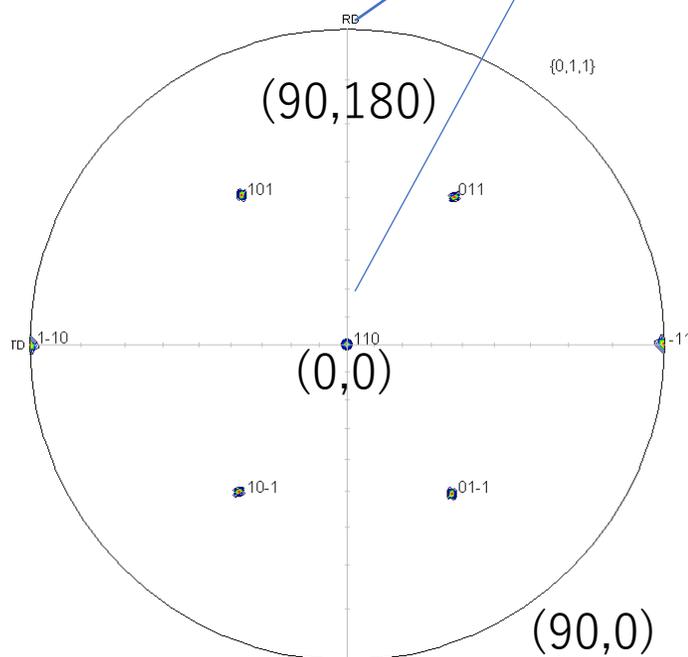
011  Center of gravity PoleFigure(TXT2)

Alpha(center=0) 0 Beta(RD=180) 0 hkl 1 1 0  
90 180  
0 0 1

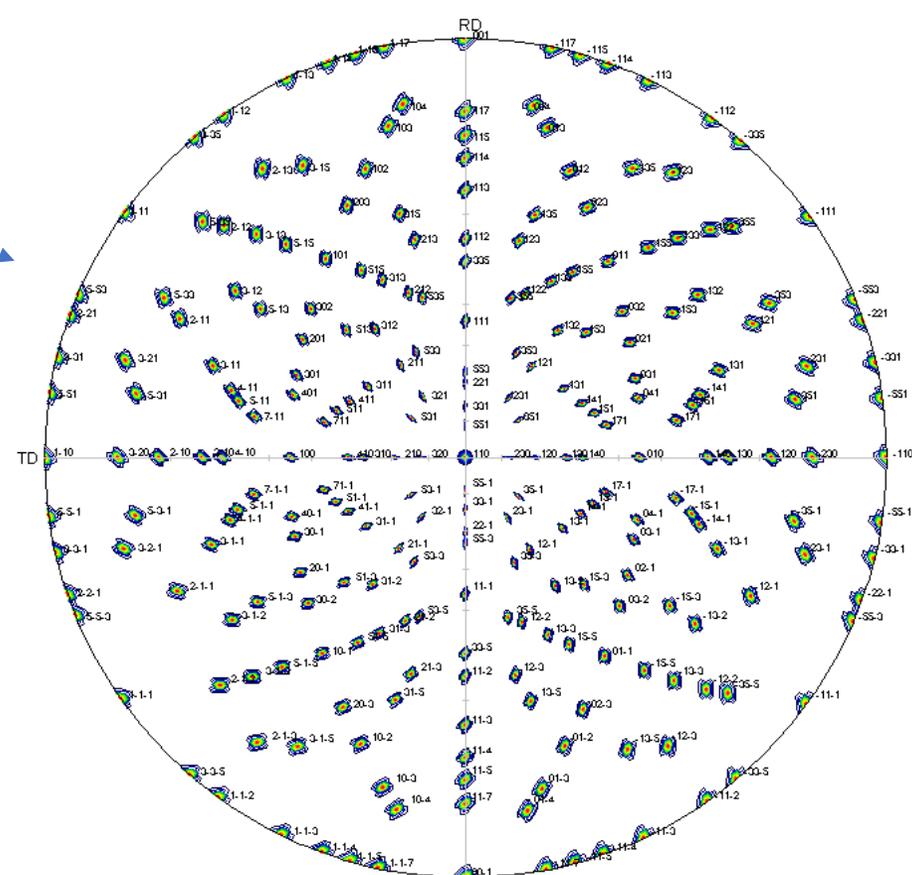
calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM 1 Max 50 Mini 0.1

CalcPoleFigure

011  
Clear  
Set  
Append  
All



All->CalcPoleFigure



# (111)標準ステレオ投影図描画

Crystal orientation determination by two refraction method T.Kikuchi V1.10

File Help Blind-15 CreatePFStep:1.0 hkldisp=true

PoleFigure

111  Center of gravity PoleFigure(TXT2)

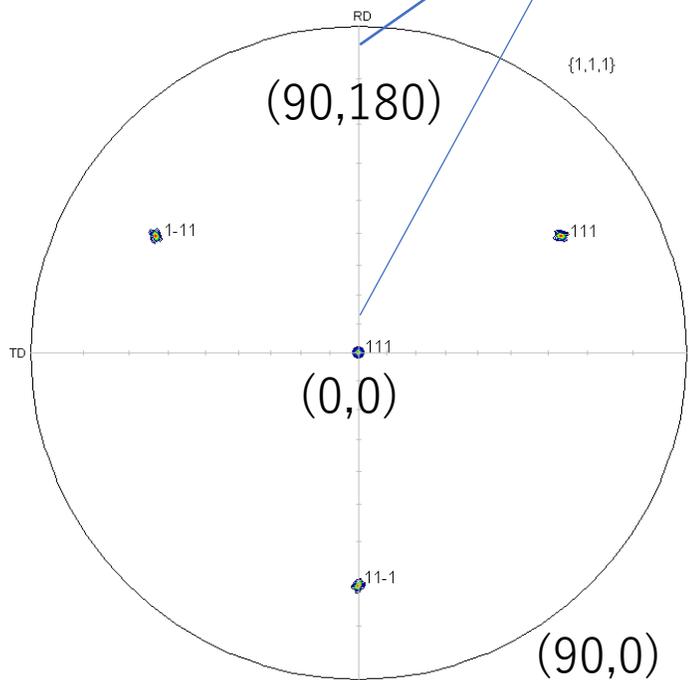
Alpha(center=0) 0 Beta(RD=180) 0 hkl 1 1 1  
90 180 -1 -1 0

calc U-matrix CalcPoleFigure FWHM 1 Max 50 Mini 0.1

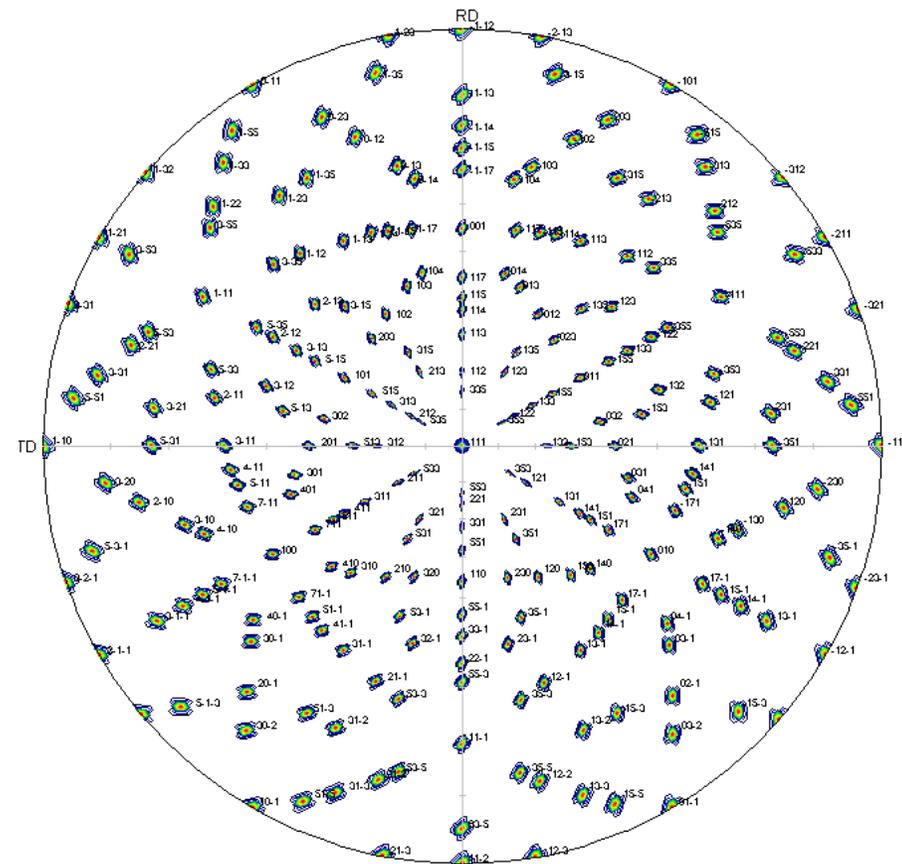
CalcPoleFigure

```
1 -1 1  
-1 1 1  
1 -1 -1  
-1 -1 1  
-1 1 -1  
-1 -1 -1
```

111  Clear  Set  Append



All->CalcPoleFigure



# (112)標準ステレオ投影図描画

Crystal orientation determination by two refraction method T.Kikuchi V1.10

File Help Blind-15 CreatePFStep:1.0 hkldisp=true

PoleFigure

112  Center of gravity PoleFigure(TXT2)

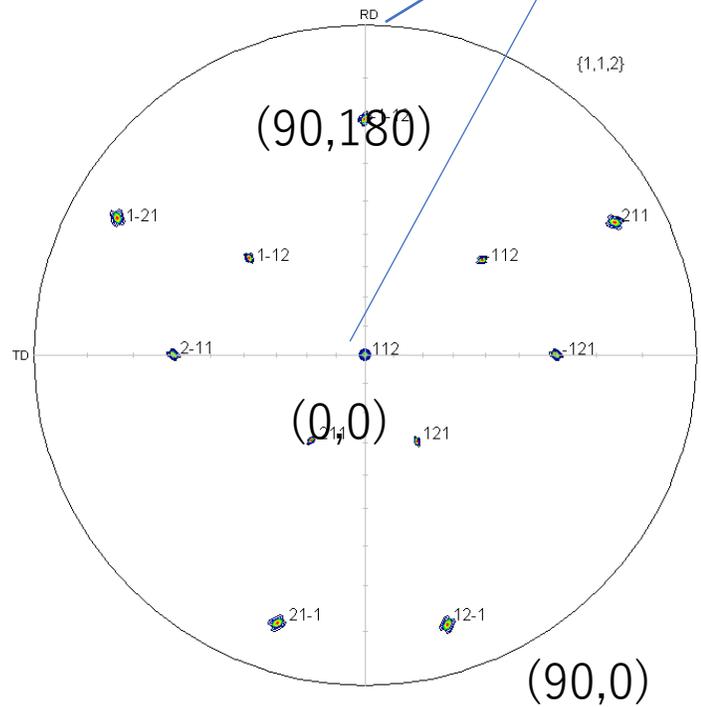
Alpha(center=0) 0 Beta(RD=180) 0 hkl 1 1 2  
90 180  
-1 -1 1

Calc PoleFigure FWHM 1 Max 50 Mini 0.1

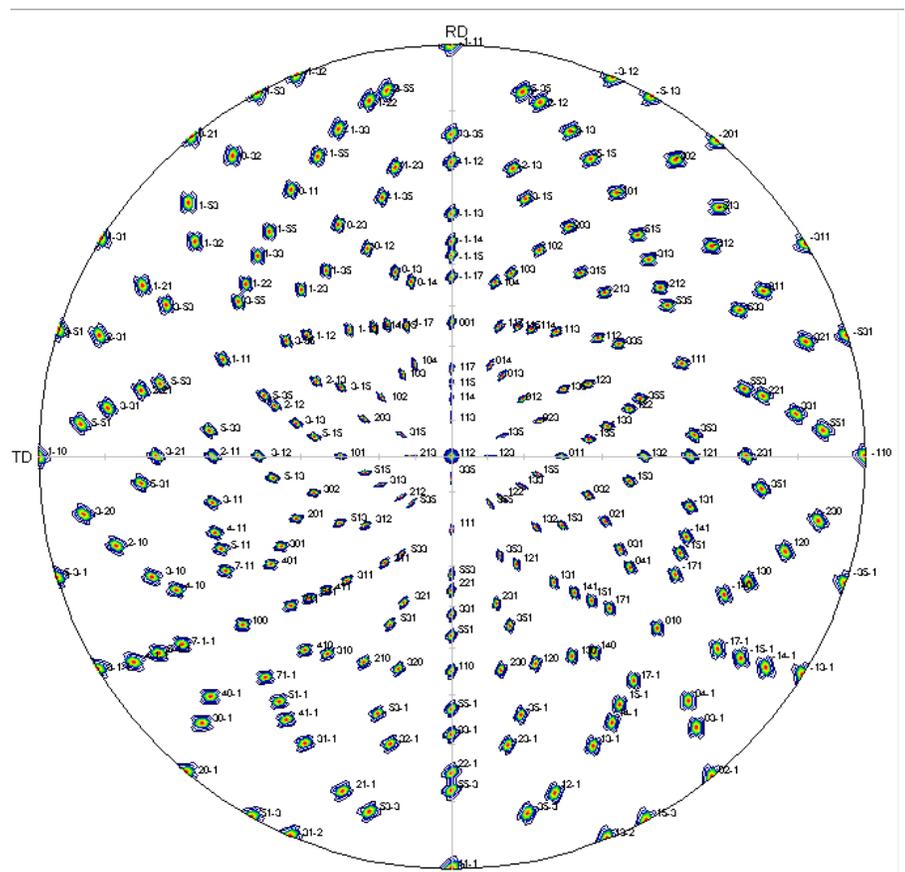
CalcPoleFigure

```
-2 1 -1  
-1 1 -2  
-1 2 -1  
-2 -1 -1  
-1 -1 -2  
-1 -2 -1
```

112  
Clear  
Set  
Append  
All

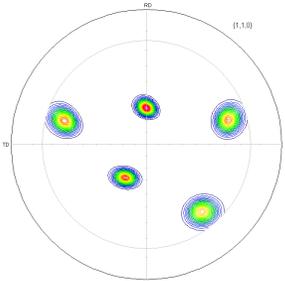


All->CalcPoleFigure









# 結晶方位の求め方

CrystalOrientationDにより  
 $\{110\}$  反射極点図から  
 $\{100\}, \{200\}, \{211\}$  完全極点図を作成

Crystal orientation determination by two refraction method T.Kikuchi V1.10  
 File Help Blind-15 CreatePFStep:1.0 hkldisp=true

PoleFigure

011  Center of gravity PoleFigure(TXT2) L:\DATA#\Stereo#\copper#\Rotation#\110\_15labotexCCW-rpR30T30N0\_2...

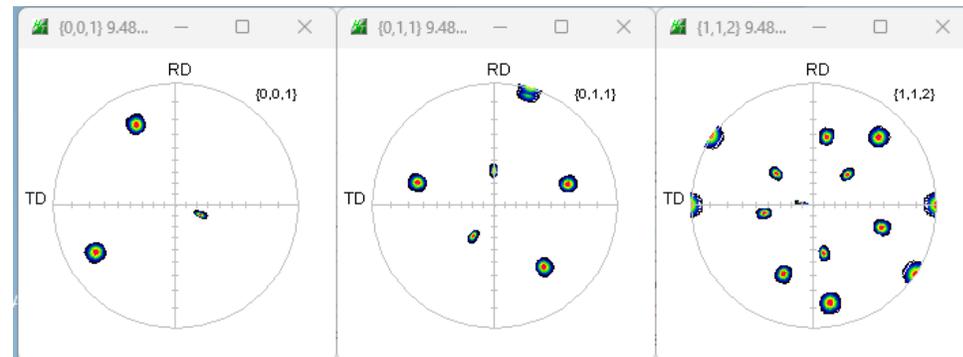
Alpha(center=0) 30.01 Beta(RD=180) 78.012 hkl 1 1 0  
 32.992 32.998 0 1 -1

Calc PoleFigure

```
1 0 0
0 1 0
0 0 1
-1 0 0
0 -1 0
0 0 -1
```

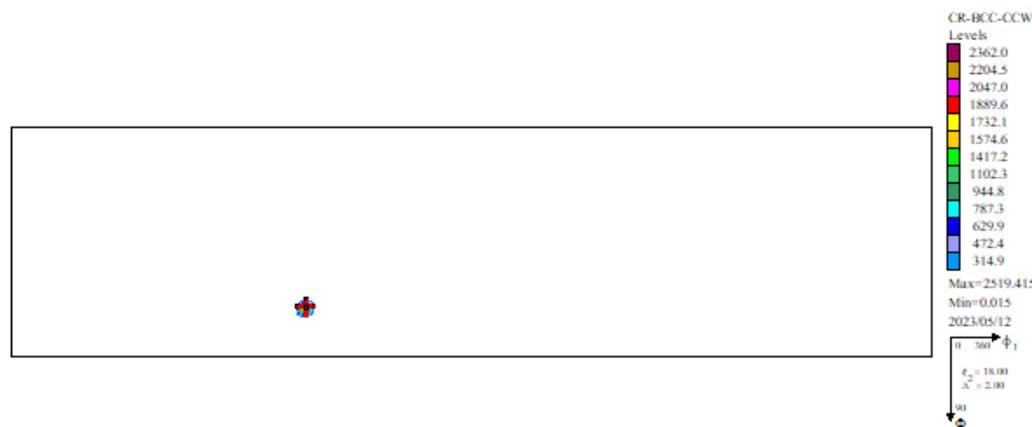
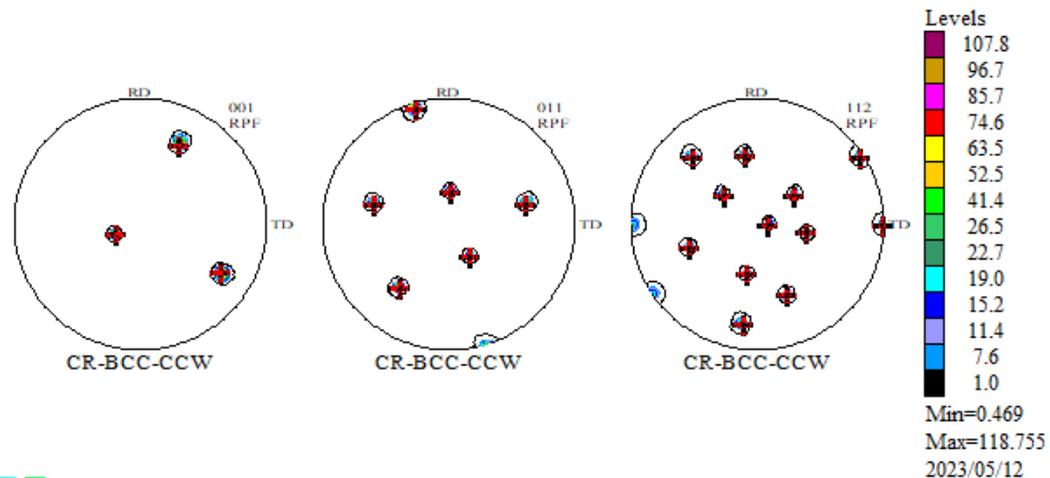
001

FWHM 5 Max 50 Mini 0.1



LaboTexにCCWで読み込み  
 $\{1\ 3\ 1\}$   $\langle -4\ -1\ 7 \rangle$  を得る

← ↑ ↻ ↺ ↓ → R Step 5.00  $\phi_2 = 115.20$   $\Phi = 70.80$   $\phi_1 = 18.00$  HKL ( 1 3 1 ) UYW [-4 -1 7]



# BCC {131}<-4-17>のSchmid因子BCCSchmidFactorCalcで計算

N F D方向のみなら方位解析は必要ありません。

Slip Systems

{011}<11-1>    {112}<11-1>    {123}<11-1>

## ND方向Schmid因子

{1 3 1}<-4 -1 7>   VF\*Schmidsum=0.445

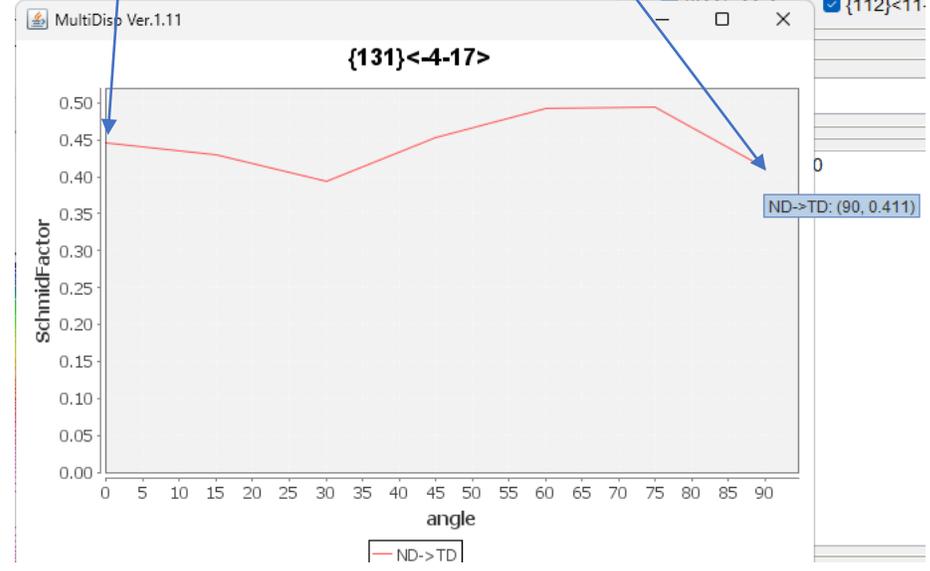
## RD方向Schmid因子

{4 1 -7}<1 3 1> to Trilinic {4 1 7}<1 3 -1>   VF\*Schmidsum=0.495

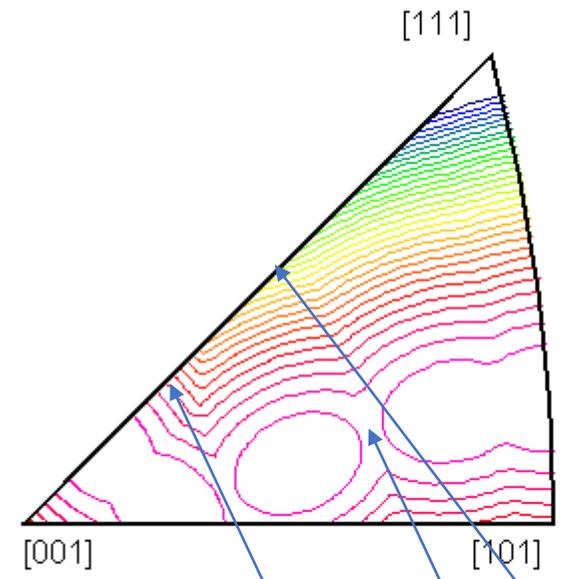
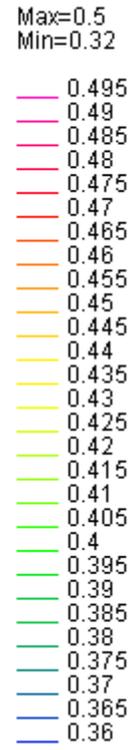
## TD方向Schmid因子

{2 -1 1}<-4 -1 7> to Trilinic {2 1 1}<-4 1 7>   VF\*Schmidsum=0.411

## ND->TDへの回転Schmid因子プロファイル



C:\CTR\work\SchmidLowBCC\Inverse.txt

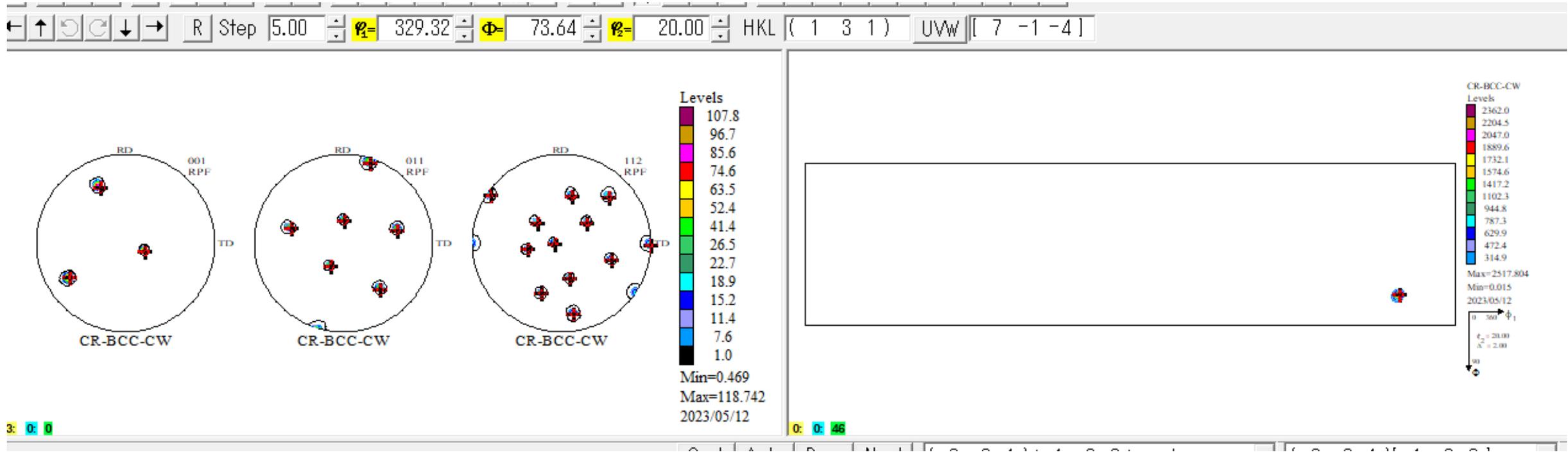


( $\phi=25.24$  ,  $\beta=45.0$ ) Z=0.45 --> [1,1,3]

( $\phi=30.5$  ,  $\beta=14.04$ ) Z=0.49 --> [4,1,7]

( $\phi=35.26$  ,  $\beta=45.0$ ) Z=0.41 --> [1,1,2]

# LaboTex CWで解析を行った場合



Approx. Miller Indices	Euler Angles
[ 1 3 1 ] [ 7 -1 -4 ]	[ 328.91, 72.45, 18.43 ]
[ 1 1 3 ] [-4 7 -1 ]	[ 196.78, 25.24, 45.00 ]
[ 3 1 1 ] [-1 -4 7 ]	[ 64.65, 72.45, 71.57 ]

CW

Approx. Miller Indices	Euler Angles
[ 1 1 3 ] [-4 7 -1 ]	[ 196.78, 25.24, 45.00 ]
[ 3 1 1 ] [-1 -4 7 ]	[ 64.65, 72.45, 71.57 ]
[ 1 3 1 ] [ 7 -1 -4 ]	[ 328.91, 72.45, 18.43 ]

CCW

Schmid因子に関しては同一の結果

# CrytalOrientationDで{113}極点図を作成を確認

LaboTexで{131}<-4-17>が計算された {113}極点図の中心に極があるはず

{110}反射極点図から  
{113}極点図を作成、中心に極があることが  
確認出来ます。

