

方位解析の基礎

多結晶、極点図、逆極点図、ODF 図表示

2024年10月13日

HelperTex Office

概要

前回単結晶の極点図、逆極点図、ODF図の描画を扱った。

今回、G o s s + C o p p e r 方位を扱ってみます。

F C C の G o s s + C o p p e r の S c h m i d 因子の計算を行う。

単体の G o s s と C o p p e r の S c h m i d 因子は、

G o s s 単体の引っ張り

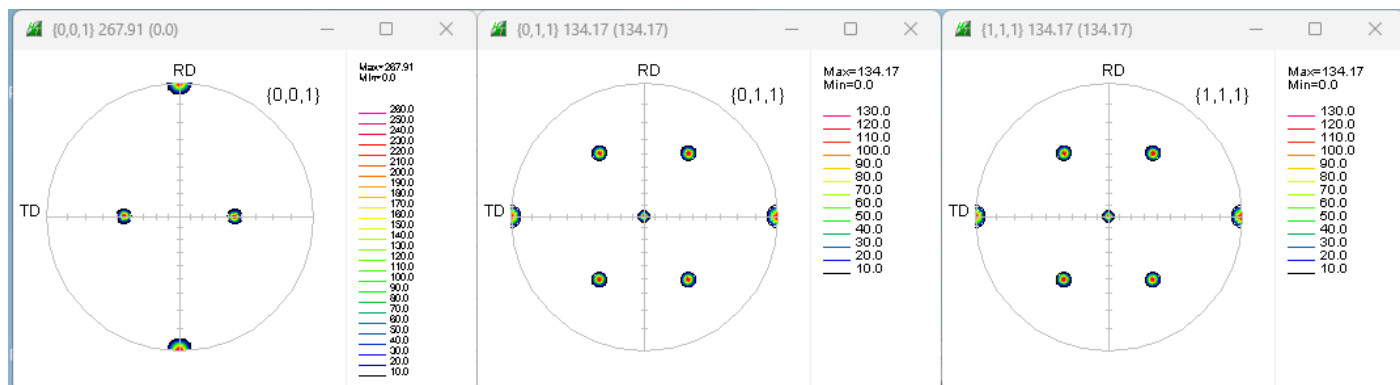
```
Calc Schmid's Factor SFmode
{1.01.00.0}<0.00.01.0> rotation (2[0.0],1[0.0],0[0.0]3[0.0])
(111)[0-11]  (111)[-101]  (111)[-110]  (-1-11)[011]  (-1-11)[101]
              (-1-11)[-110]  (-111)[0-11]  (-111)[101]  (-111)[110]
              (1-11)[011]  (1-11)[-101]  (1-11)[110]
-0.408        -0.408        0.0          -0.408        -0.408
              0.0          0.0          0.0          0.0
              0.0          0.0          0.0
input         VF%          Schmid        VF*Schmid%
{1.01.00.0}<0.00.01.0>  100.0        0.0          0.0
VFsum=100.0%          VF*Schmidsum=0.0
SchmidFactor(SumVF)=0.0
```

C o p p e r 単体の引っ張り

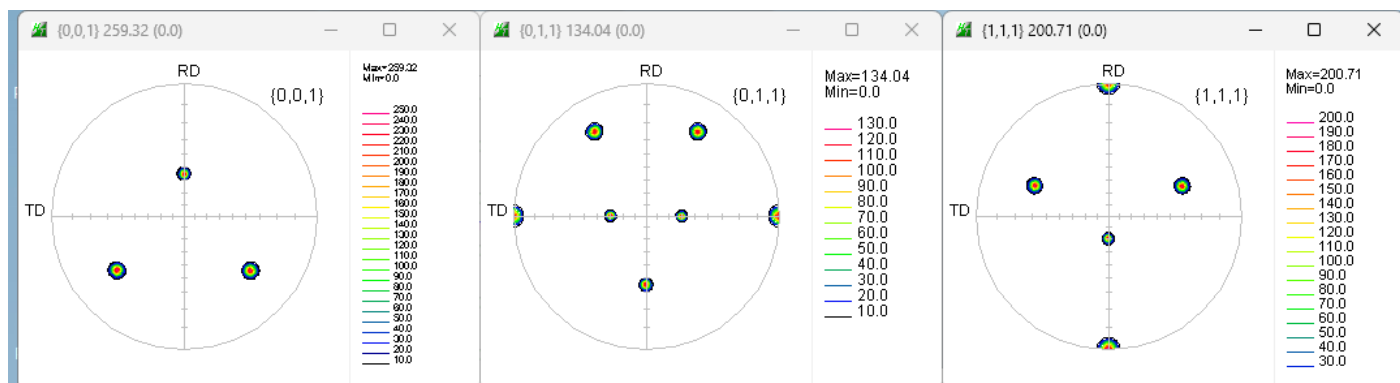
```
Calc Schmid's Factor SFmode
{1.01.02.0}<-1.0-1.01.0> rotation (2[0.0],1[0.0],0[0.0]3[0.0])
(111)[0-11]  (111)[-101]  (111)[-110]  (-1-11)[011]  (-1-11)[101]
              (-1-11)[-110]  (-111)[0-11]  (-111)[101]  (-111)[110]
              (1-11)[011]  (1-11)[-101]  (1-11)[110]
0.272         0.272        0.0          0.0          0.0
              0.0          0.136        0.408        0.272
              0.408        0.136        0.272
input         VF%          Schmid        VF*Schmid%
{1.01.02.0}<-1.0-1.01.0>  100.0        0.408        0.408
VFsum=100.0%          VF*Schmidsum=0.408
SchmidFactor(SumVF)=0.408
```

以下にG o s s と C o p p e r の極点図を合成し、ODF解析後G o s s + C o p p e r の S c h m i d 因子計算を行う。

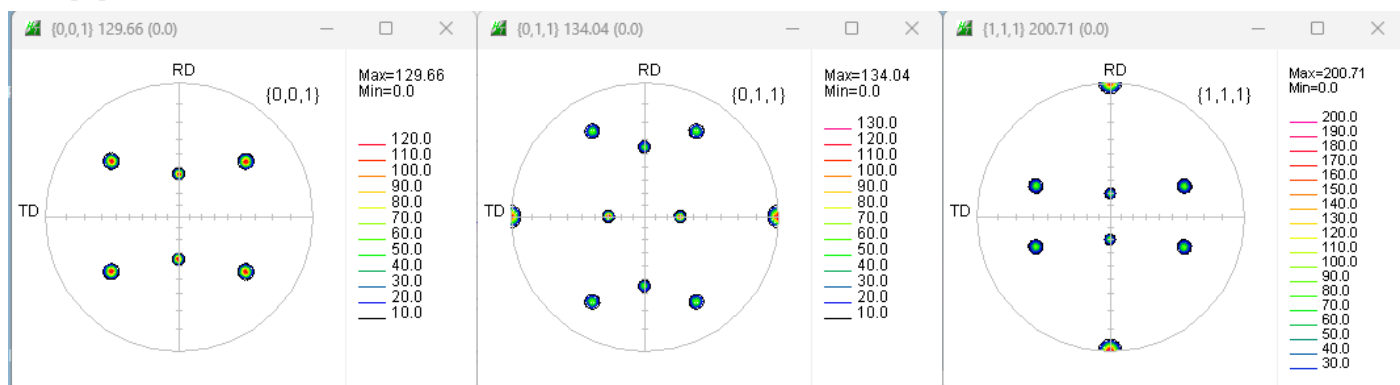
G o s s 方位 $\{110\} \langle 001 \rangle$ の極点図



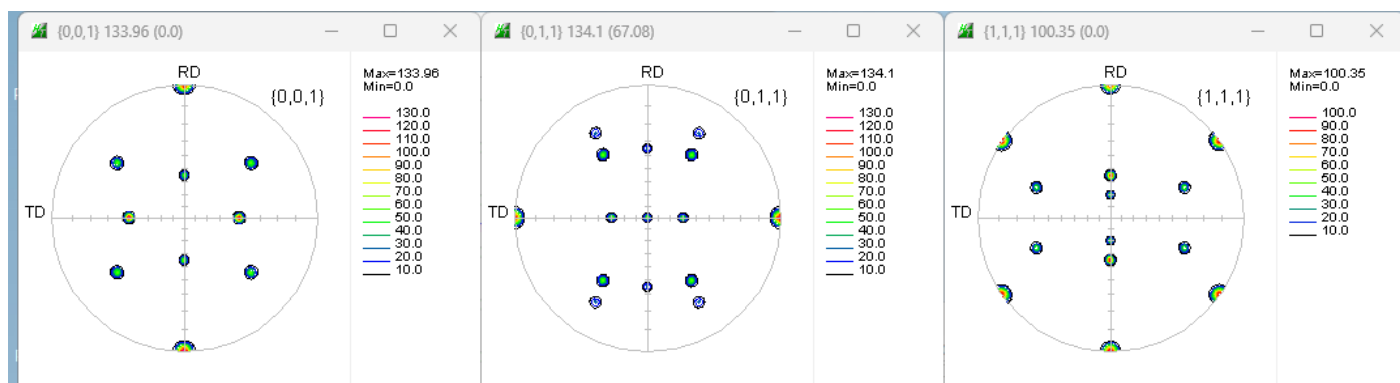
C o p p e r 方位 $\{112\} \langle -1-11 \rangle$



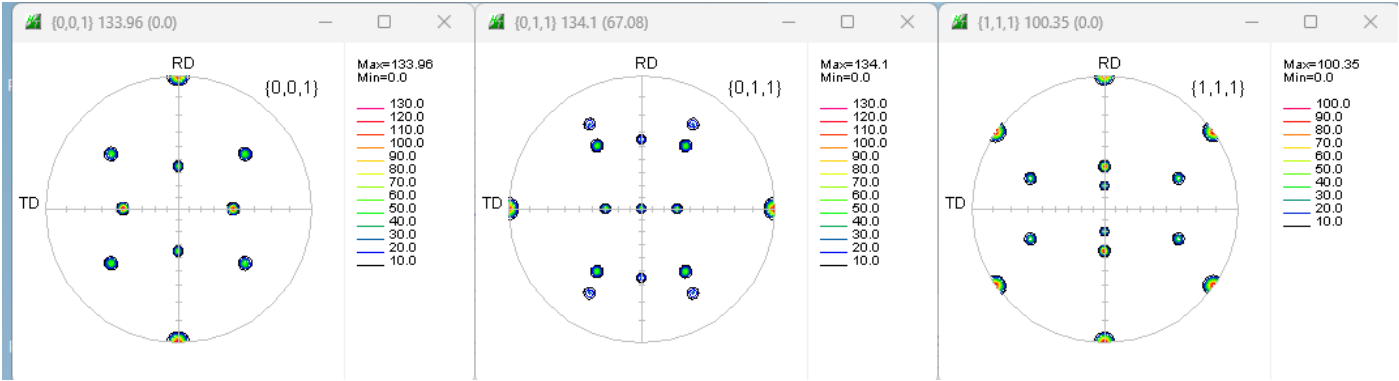
C o p p e r の Orthorhombic 化



G o s s + C o p p e r 極点図

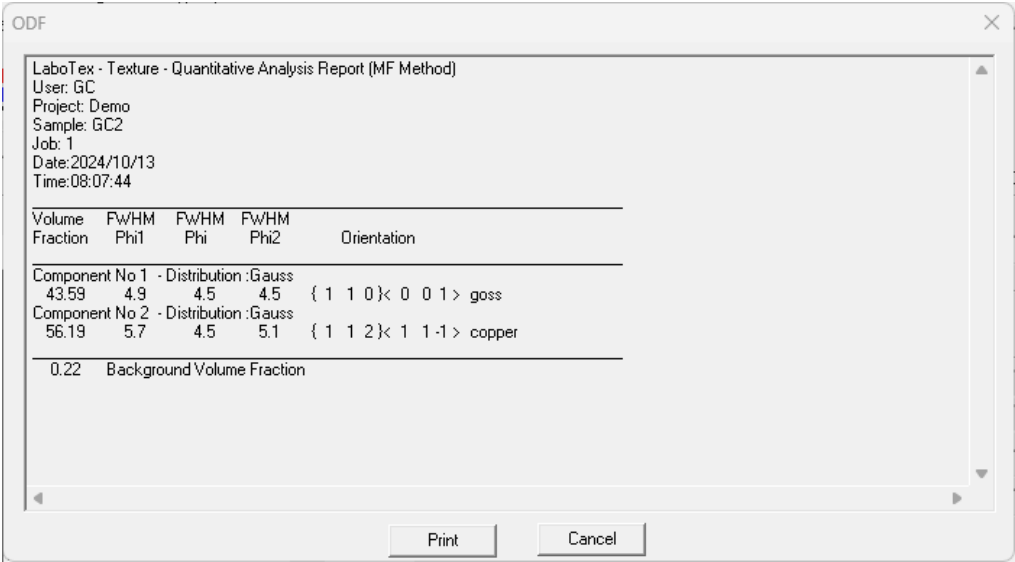
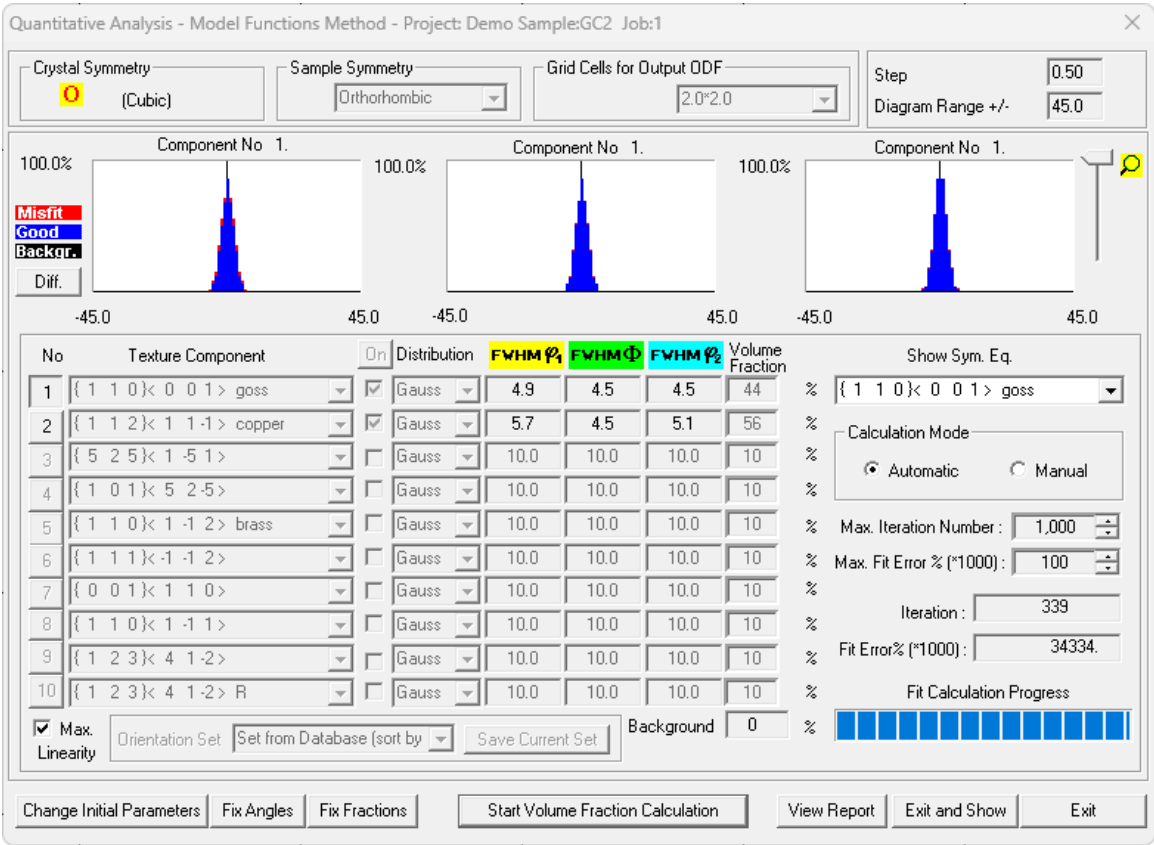


多結晶のSchmid因子計算は方位のVolumeFraction計算が必要



の極点図からVolumeFraction計算を行う。

以下はLaboTexによるVolumeFraction計算



S c h m i d 因子計算

引っ張り

L a b o T e の V F 結果

BCCSchmidFactorCalc3 3.16 by CTR PDuser user CTR

File Help Text SlipProfile ND(NDRotate) SF Orthorhombic

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVFmode)

{1 1 0}<0 0 1> 100.0

C:\LaboTex2\USER\GC.LAB\O-Cubic.LAB\Demo.LAB\GC2.LAB\Job02\GC2.POD

Disp

DISP

Slip Systems

☐ {011}<11-1> ☐ {112}<11-1> ☐ {123}<11-1> ☒ FCC{111}<1-10> ☐ Stack

Inverse

Data input

real [h k l] or [h k l]

Input

[h k l]Ku v w>

Input

phi1 PHI phi2 phi1<=90,PHI<=90

Input

{1 1 0}<0 0 1> 43.59
{1 1 2}<1 1 -1> 56.19

0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0
{1.02.01.0}<1.0-1.01.0> rotation (2[0.0],1[0.0],0[0.0]3[0.0])
(111)[0-11] (111)[-101] (111)[-110] (-1-11)[011] (-1-11)[101]
(-1-11)[-110] (-111)[0-11] (-111)[101] (-111)[110]
(1-11)[011] (1-11)[-101] (1-11)[110]
-0.272 0.0 0.272 -0.408 -0.272
-0.136 -0.136 0.272 0.408
0.0 0.0 0.0 0.0
input VF% Schmid VF*Schmid%
{1.01.00.0}<0.00.01.0> 43.59 0.0 0.0
{1.02.01.0}<1.0-1.01.0> 56.19 0.408 0.229
VFsum=99.78% VF*Schmidsum=0.229
SchmidFactor(SumVF)=0.23

引っ張り + 圧縮

BCCSchmidFactorCalc3 3.16 by CTR PDuser user CTR

File Help Text SlipProfile ND(NDRotate) abs(SF) Orthorhombic

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVFmode)

{1 1 0}<0 0 1> 100.0

C:\LaboTex2\USER\GC.LAB\O-Cubic.LAB\Demo.LAB\GC2.LAB\Job02\GC2.POD

Disp

DISP

Slip Systems

☐ {011}<11-1> ☐ {112}<11-1> ☐ {123}<11-1> ☒ FCC{111}<1-10> ☐ Stack

Inverse

Data input

real [h k l] or [h k l]

Input

[h k l]Ku v w>

Input

phi1 PHI phi2 phi1<=90,PHI<=90

Input

{1 1 0}<0 0 1> 43.59
{1 1 2}<1 1 -1> 56.19

0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0
{1.02.01.0}<1.0-1.01.0> rotation (2[0.0],1[0.0],0[0.0]3[0.0])
(111)[0-11] (111)[-101] (111)[-110] (-1-11)[011] (-1-11)[101]
(-1-11)[-110] (-111)[0-11] (-111)[101] (-111)[110]
(1-11)[011] (1-11)[-101] (1-11)[110]
-0.272 0.0 0.272 -0.408 -0.272
-0.136 -0.136 0.272 0.408
0.0 0.0 0.0 0.0
input VF% Schmid VF*Schmid%
{1.01.00.0}<0.00.01.0> 43.59 0.408 0.178
{1.02.01.0}<1.0-1.01.0> 56.19 0.408 0.229
VFsum=99.78% VF*Schmidsum=0.407
SchmidFactor(SumVF)=0.408

手順

G o s s、C o p p e r 極点図作成

C r y s t a l O r i e n t a t i o n ソフトウェア

T r i c l i n i c → O r t h o r h o m b i c 変換

P F R o t a t i o n ソフトウェアにて, t o O r t h o r h o m b i c 化

G o s s + C o p p e r

A d d i n g P o l e ソフトウェアで加算

L a b o T e x 入力データ

P F t o O D F 3 ソフトウェア

S c h m i d 因子計算

B C C S c h m i d F a c t o r C a l c ソフトウェア