

ODF 解析後の逆極点図描画ソフトウェア

GP Inverse Display ソフトウェア

Ver1.44

InverseCubicContourDisplay(Ver1.01)と連携

InverseContourDisplayMaterialDataManual と連動

2020年11月07日

HelperTex Office

Ver1.2 2016/11/10 Hexagonal バグ修正
Ver1.21 2017/03/21 ODF16 データ渡しを追加
Ver1.22 2018/02/06 MTEX データの取り込み
Ver1.23 2018/02/14 InverseDisplayXY の最大密度指定
Ver1.24 2018/07/24 TexTools ファイル外部起動
Ver1.25 2018/10/16 MTEX 2530line に対応
Ver1.27 2019/02/12 MTEX に ND/TD/RD 選択追加
Ver1.28 2019/06/22 LaboTexHexagonal 非対称逆極点図を平均に変更
Ver1.29 2019/06/23 MTEX 3DInverse 見直し
Ver1.30 2019/06/25 TexTools 時,InverseCubicContourDisplay の outside,All が表示されない修正
Ver1.31 2019/07/16 Hexagonal 3Axis [001]-[101]-[111] -> [001]-[210]-[110]に変更
Ver1.32 2019/10/20 LaboTexHexa 逆極点図上下、平均
Ver1.33 2019/10/22 LaboTex([101]+[011])/2
Ver1.34 2019/11/17 GPInverseDisplay の処理結果 T X T 読み込み
Ver1.35 2020/08/23 MTEX の Orthorombic 表示, β 入れ替え
Ver1.40 2020/10/06 MTEX のデータ読み込みに Spline の導入
Ver1.41 2020/10/22 EBSD データの MTEX 解析,逆極点 91*55 に対応
Ver1.42 2020/10/29 EBSD,MTEX で解析した逆極点図 91*61 対応 (Hexa-D6)
Ver1.43 2020/10/31 MTEX Tetoragonal 91*46 対応
Ver1.44 2020/11/07 MTEX 181*91 の表裏平均化

目次

1. 概要
2. 仕様
3. ソフトウェアの使い方
4. StandardODFによるCubic計算
5. Direction \leftrightarrow Plane表示
6. Cubic比較
7. Hexagonal比較
8. Tetragonal (Nd₂Fe₁₄B) の場合
9. Orthorhombic (PE) の場合
10. Monoclonic (PP) の場合
11. MTEX対策

各社ODFソフトウェアでODF解析を行うと、ODF図、再計算極点図、逆極点図が計算される。表示方法は統一されていなく、比較を行う場合不便である。CTRソフトウェアでは各社解析結果の表示が可能のため、同一方法の表示が可能になります。ODF図であれば、GPODFDisplayソフトウェア再計算極点図であれば、GPPoleDisplayソフトウェアしかし、逆極点図では、CubicはInverseDisplayソフトウェアHexagonalは、InverseDisplayHexaソフトウェアで実現していました。Tetragonal, Orthorhombicをサポートするに当たり、Cubic、Hexagonalを含めた逆極点図ソフトウェアをGPInverseDisplayソフトウェアとしました。popLAでは、Cubic、Hexagonalの解析は可能であるが、TetiragonalやOrthorhombicは非現実的と思われる。

2. 仕様

対象ODF

LaboTex, popLA, StandardODF, TextTools

結晶系

Cubic, Tetragonal, Orthorhombic, Hexagonal
Monoclinic、をサポートTriclinic選択では、ファイル入力が禁止される

計算

Plnae, Direction

Hexagonal

3指数表示、4指数表示

サポートソフトウェア

MaterialData

InverseCubicContourDisplay

描画ソフトウェア

InverseDisplayXY

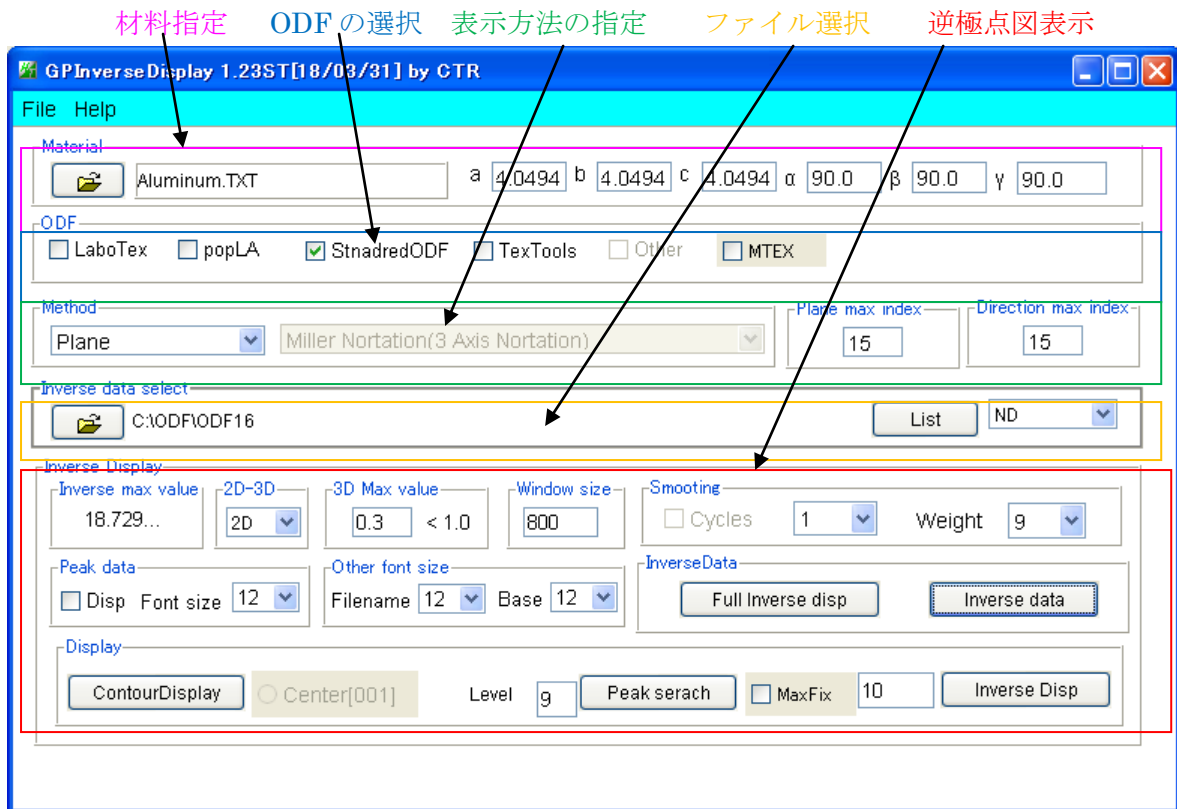
GPInverseDisplayAll

起動

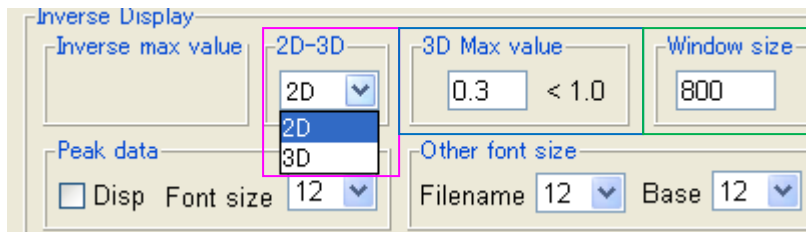
CTR¥bin¥GPInverseDisplay.jar のダブルクリック

ODFPoleFigure2->ToolKit->InverseTools->GPInverseDisplay

3. ソフトウェアの使い方



逆極点図の2D表示<->3D表示切り替え 3D表示の最大値指定 逆極点図画面サイズ



逆極点図表示文字サイズ指定



方位

ファイル名

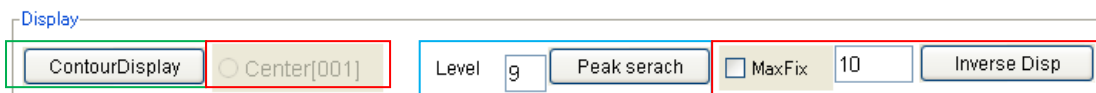
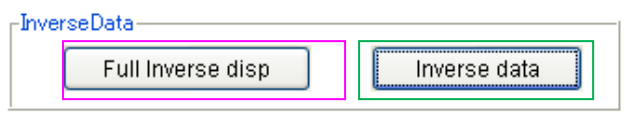
基準方位

計算部分

ファイルよりデータ読み込み

Inverse エリア計算

等高線表示



等高線表示

Monoclinic の逆極点中心変更

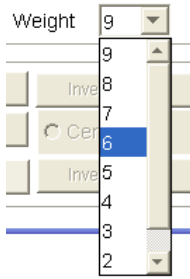
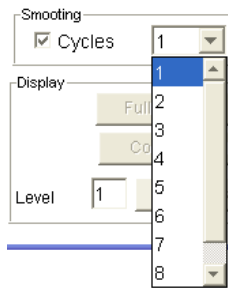
ピームサーチ

逆極点図描画

最大密度

指定出来る最大値は、実際の最大値と同等、あるいは同等以上

平滑化

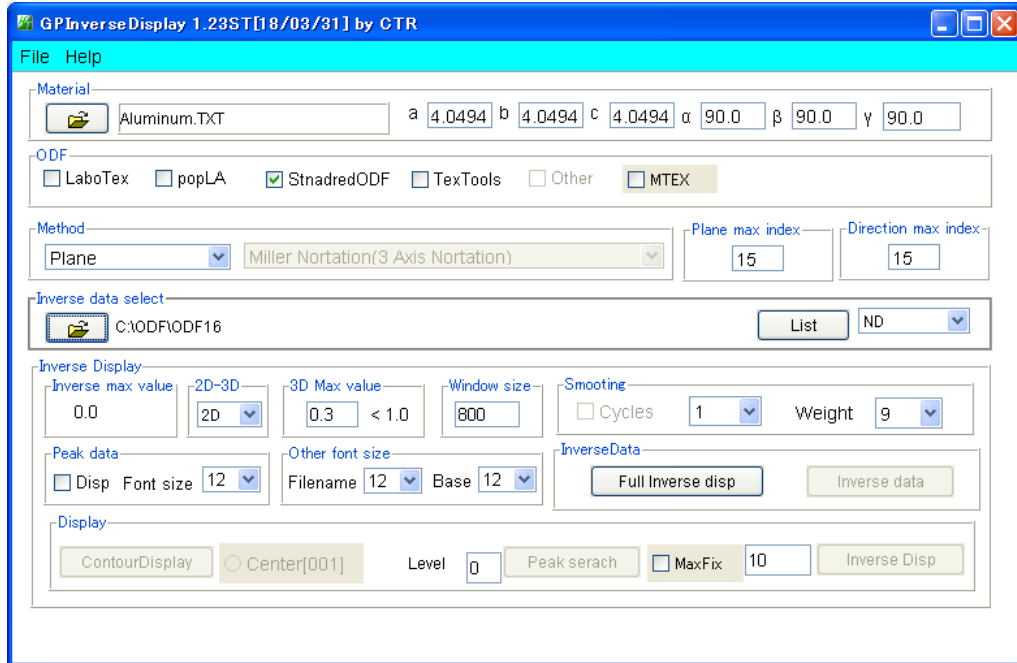


上下3点の平均
Cycle は繰り返し
Weight は中心の重み

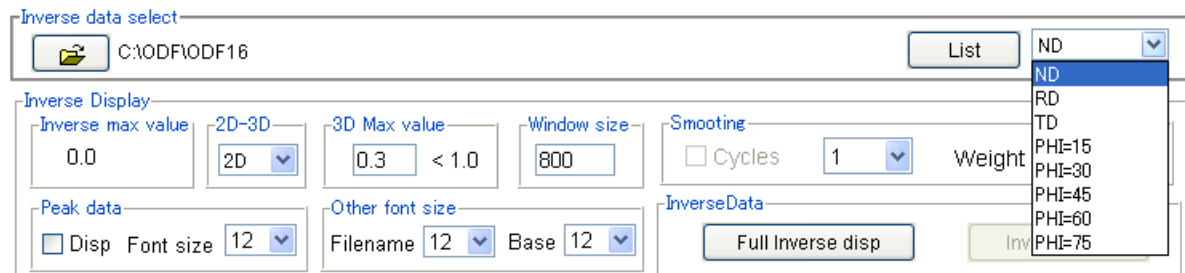
4. StandardODFによるCubic計算

StandardODFはCubic材料のODF計算を行う。

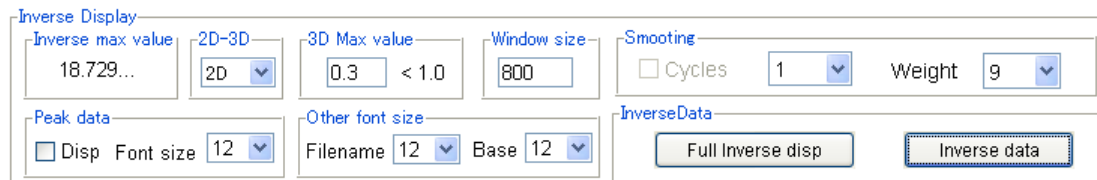
逆極点図データは、OUTPUT2.TXT から読み込む(Ver1.05以降はODF16に変更)



方位の選択

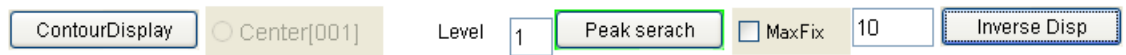


データ読み込む



Inverseエリア計算->最大方位が18.7と表示される

Display

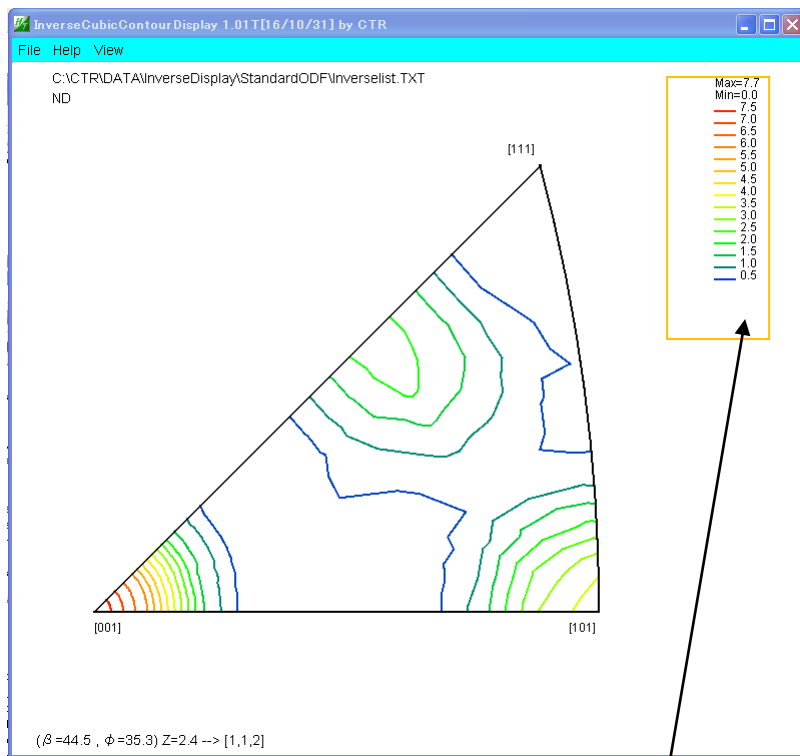


ピークサーチ {101}の計算が行われる。

{1 0 1} 45.0 0.0 18.73 45.0 0.0

ContourDisplay

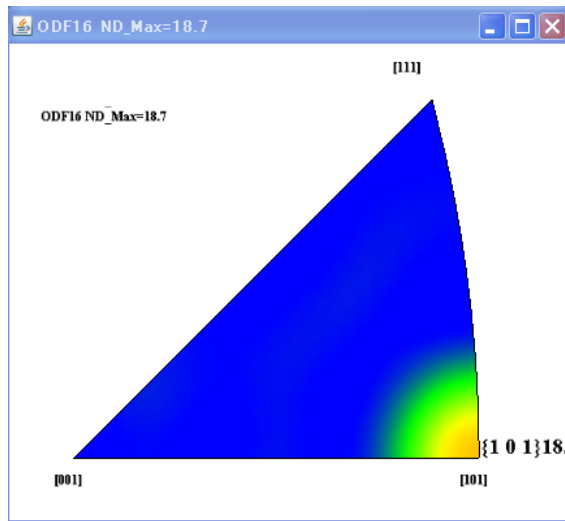
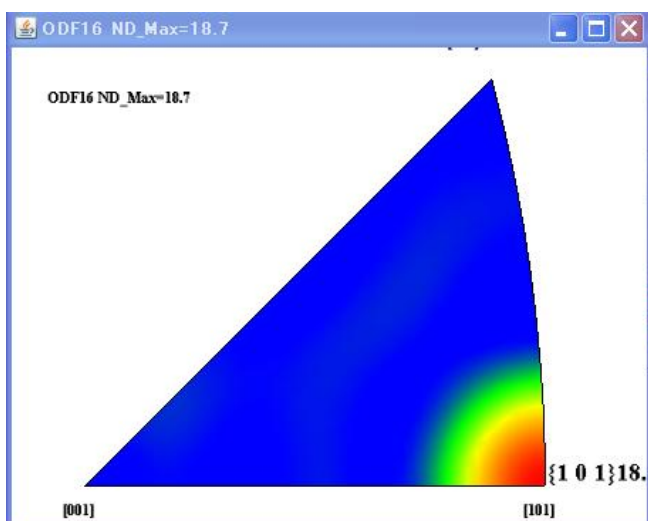
ContourDisplay で InverseCubicContourDisplay (Ver1.01 以降) が表示されます。



クリックで等高線色、密度変更が可能

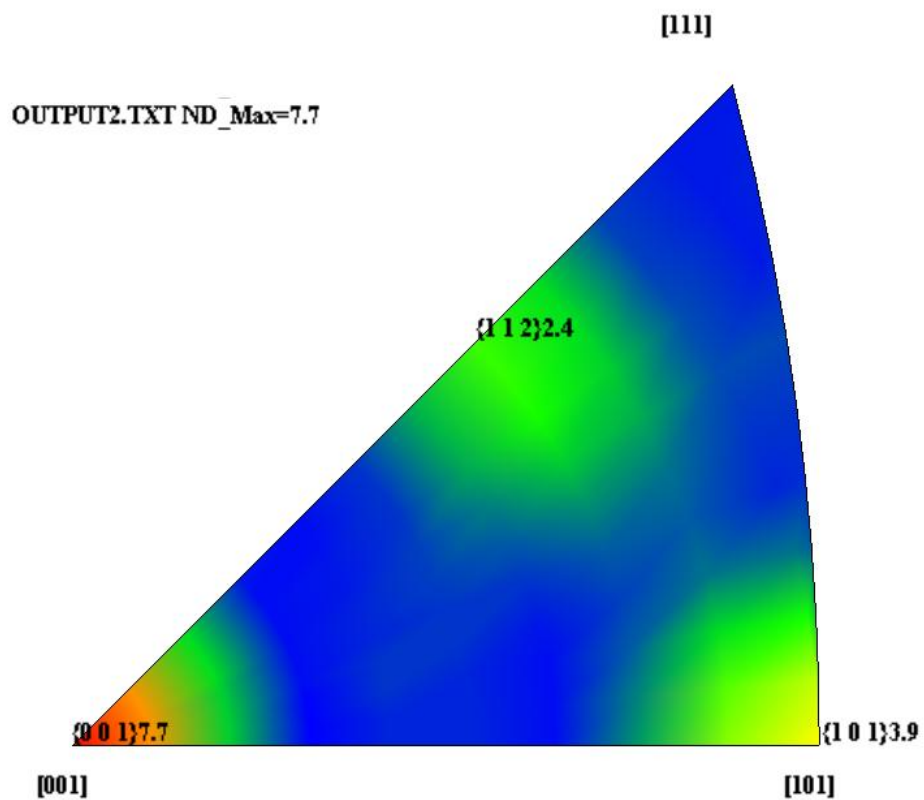
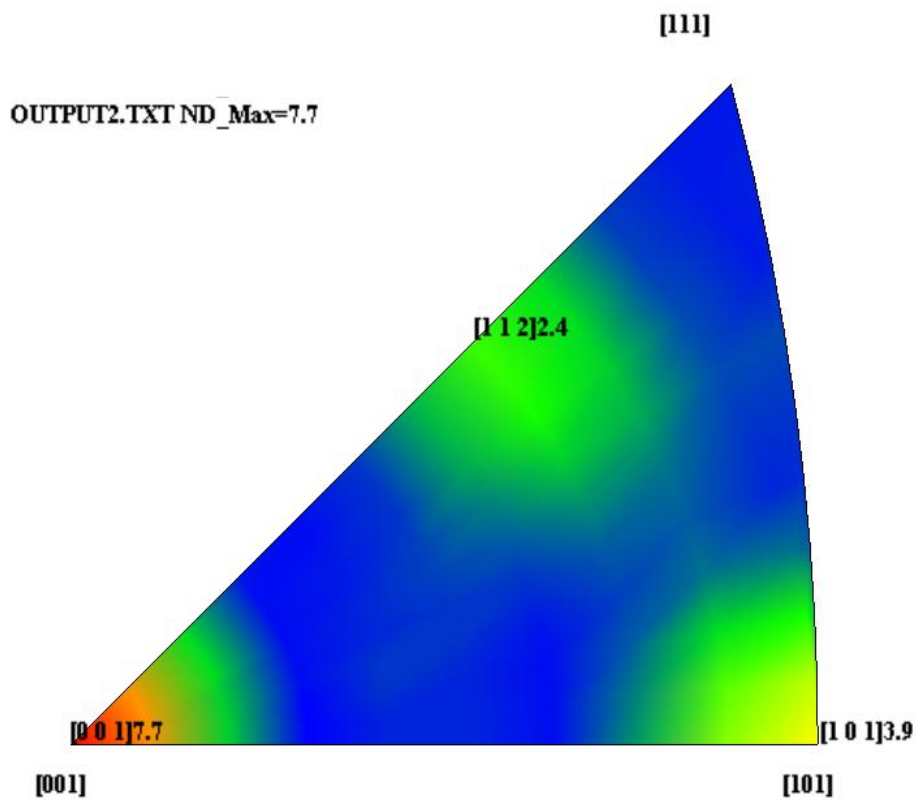
MaxFix 10 Inverse Disp

MaxFix 30 Inverse Disp



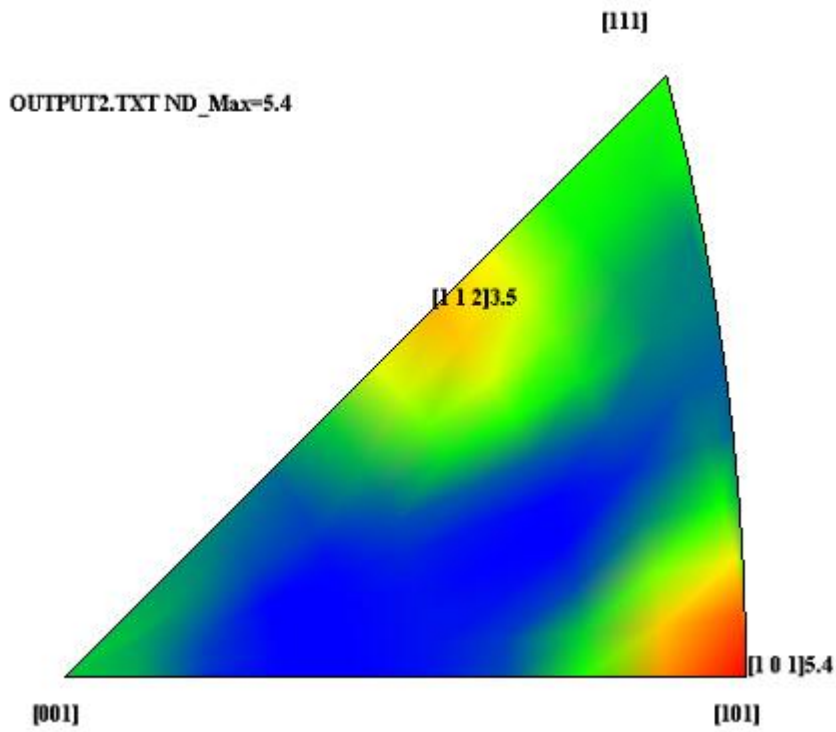
MaxFixモードでは、実際のより低い値は設定出来ません。

InverseDisp で 3D 逆極点図が表示されます。



Cubic の場合 Plane でも Direction でも同じ

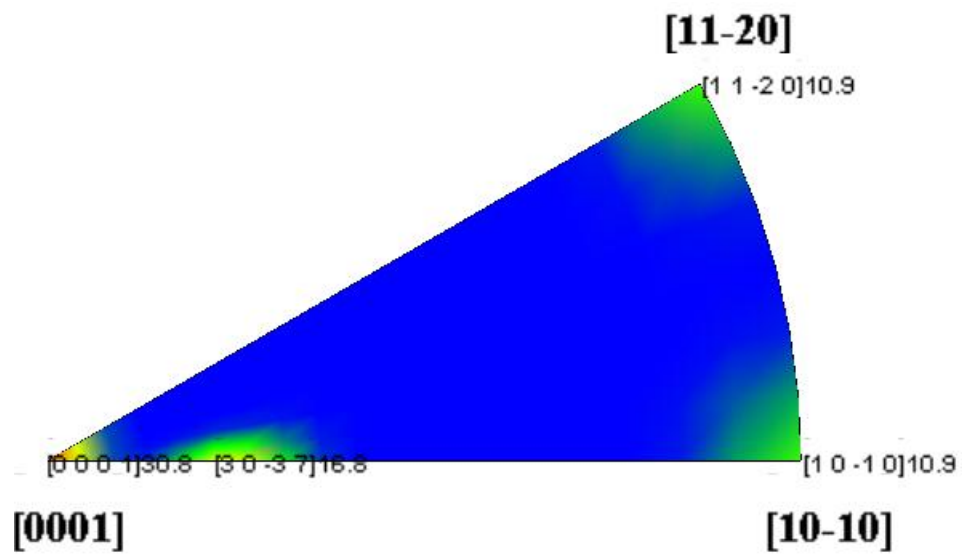
{1 1 2}	35.0	45.0	2.4	35.0	45.0
{1 0 1}	45.0	0.0	3.9	45.0	0.0
{0 0 1}	0.0	0.0	7.7	0.0	0.0



5. Direction \leftrightarrow Plane 表示

Direction 表示

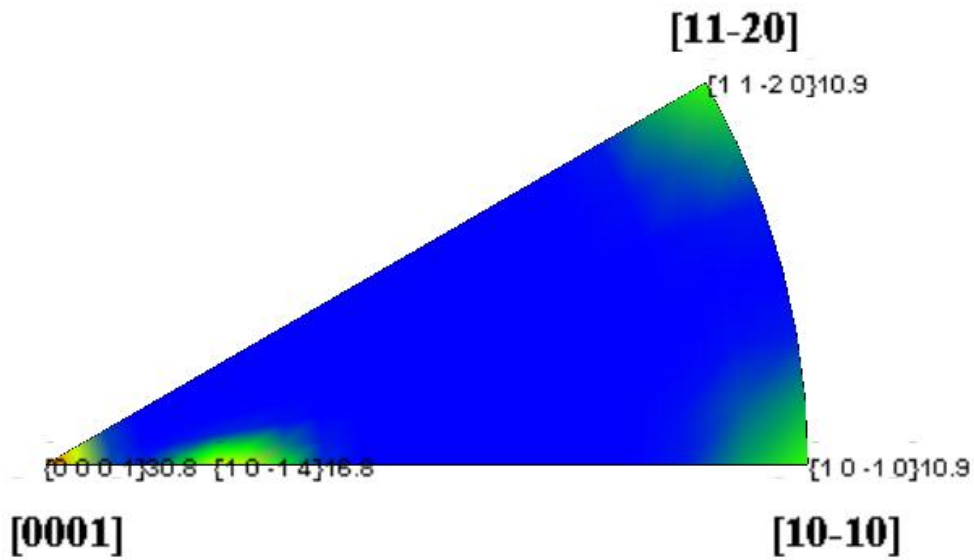
[3 0 -3 7]	25.0	30.0	16.8	25.0	0.0
[0 0 0 1]	0.0	30.0	30.8	0.0	0.0
[1 0 -1 0]	90.0	30.0	10.9	90.0	0.0
[1 1 -2 0]	90.0	60.0	10.9	90.0	30.0



Ti.TPF ND_Max=35.8

Plane 表示

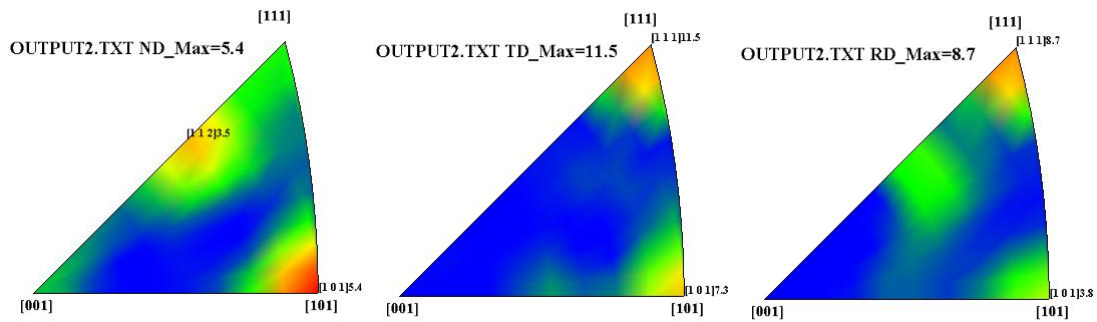
{1 0 -1 4}	25.0	30.0	16.8	25.0	0.0
{0 0 0 1}	0.0	30.0	30.8	0.0	0.0
{1 0 -1 0}	90.0	30.0	10.9	90.0	0.0
{1 1 -2 0}	90.0	60.0	10.9	90.0	30.0



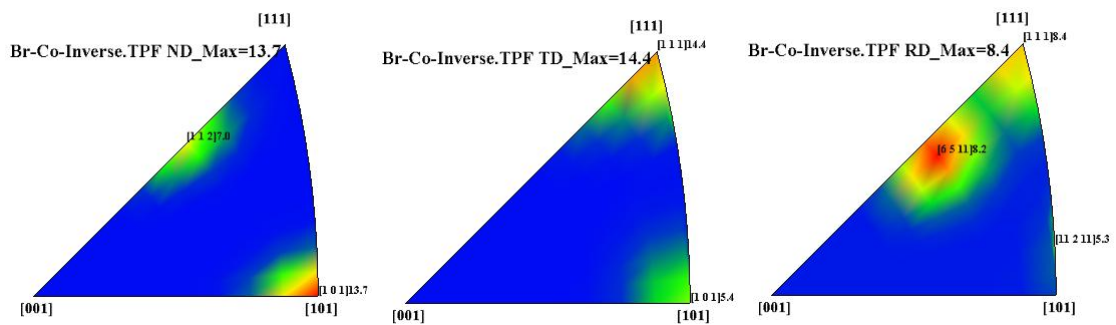
Ti.TPF ND_Max=36.8

6. Cubic 比較

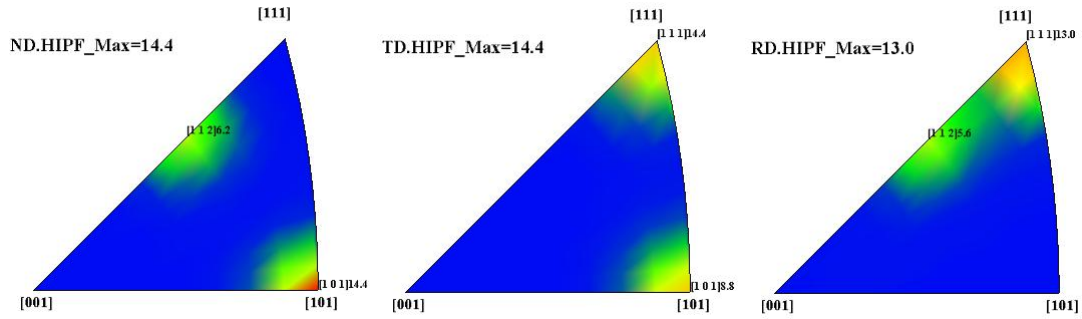
StandardODF



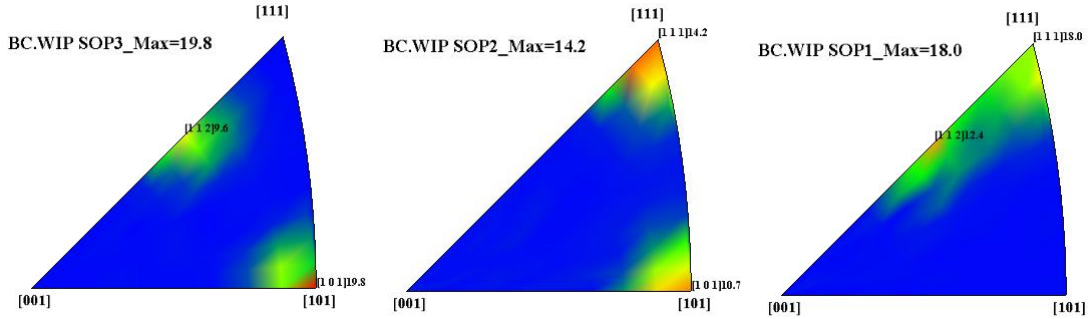
LaboTex



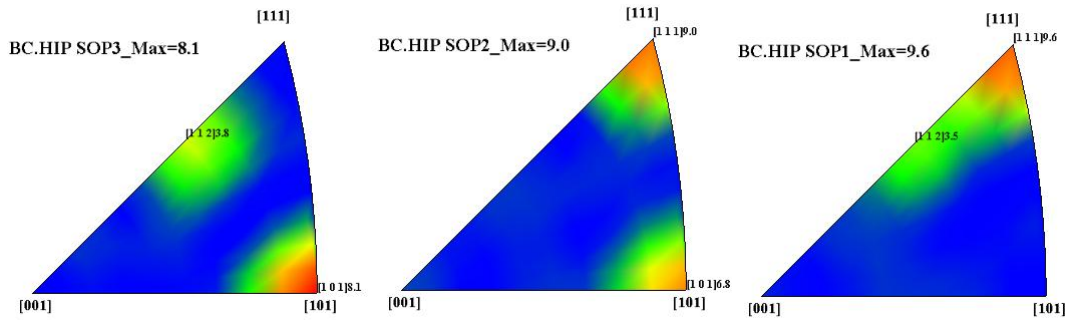
TexTools



popLA(WIMV)



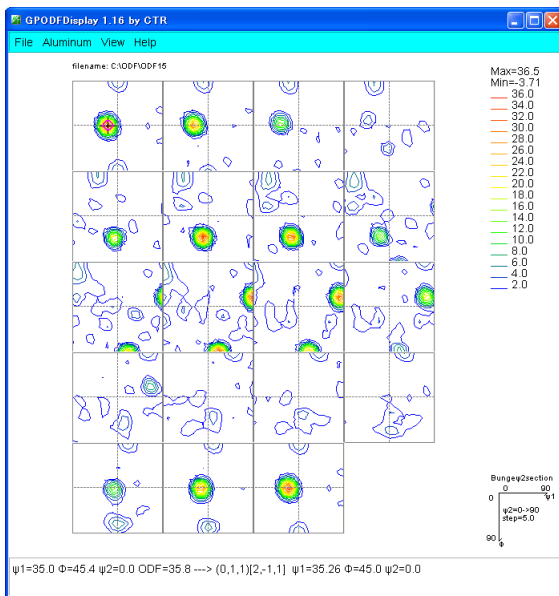
popLA(Hermonic)



このように方位密度は異なり、RD 方向では、方位位置や相対密度まで異なります。

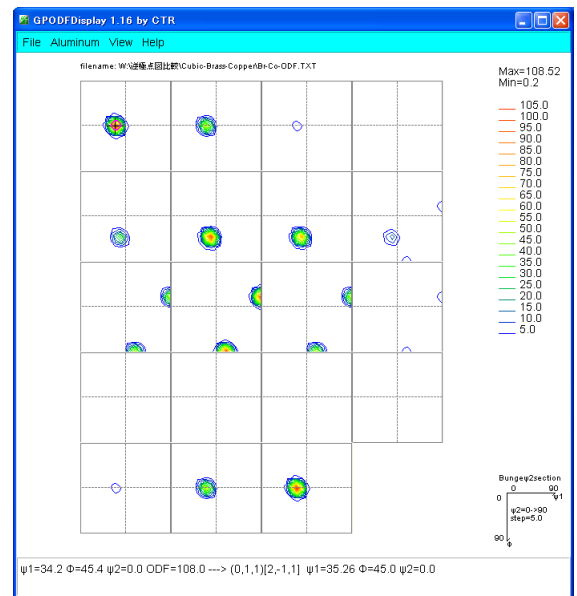
ODF 図では

StandardODF

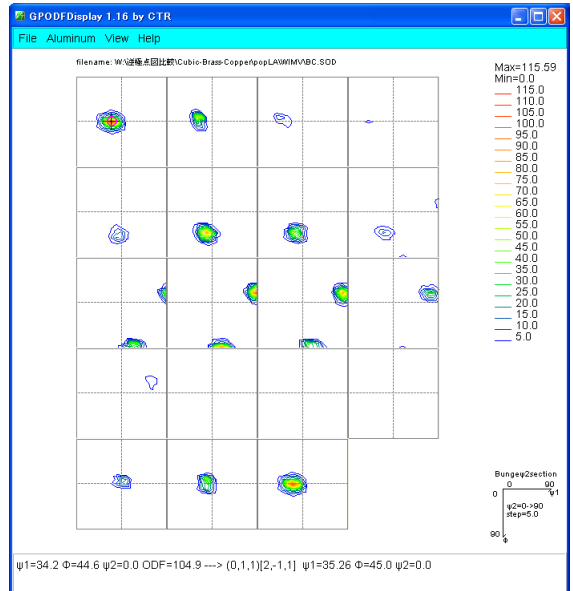
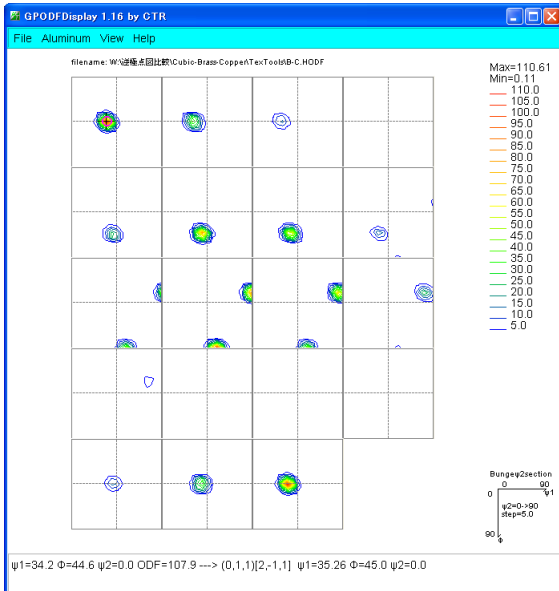


TexTools

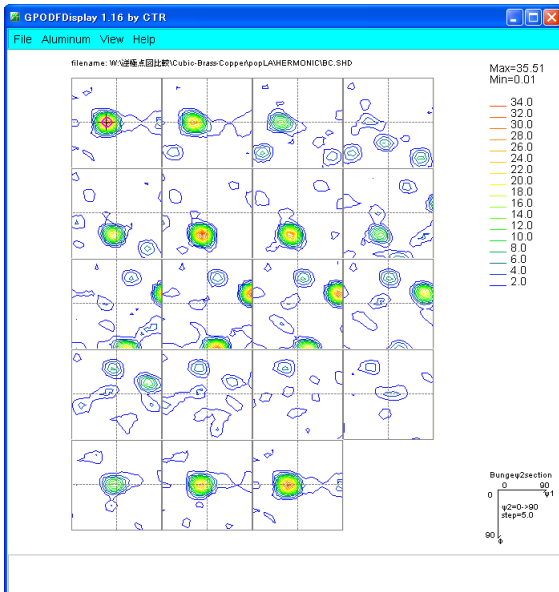
LaboTex



popLA (WIMV)

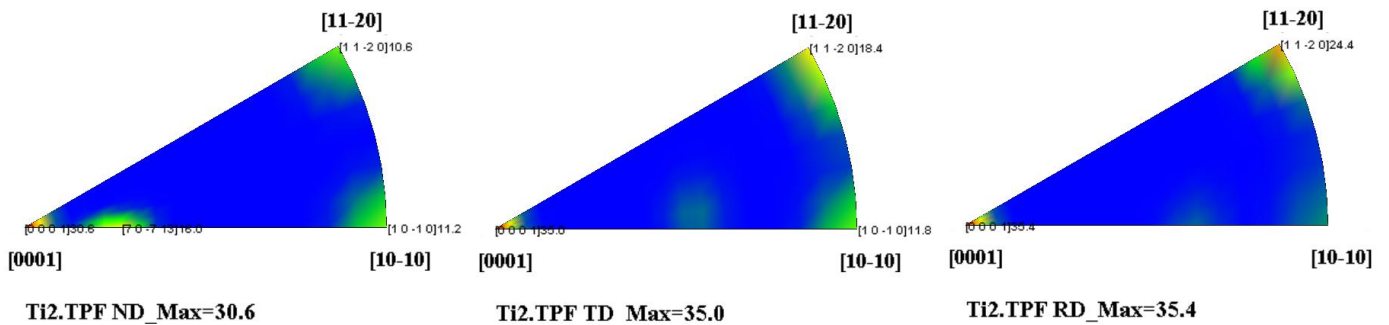


popLA(Hermonic)

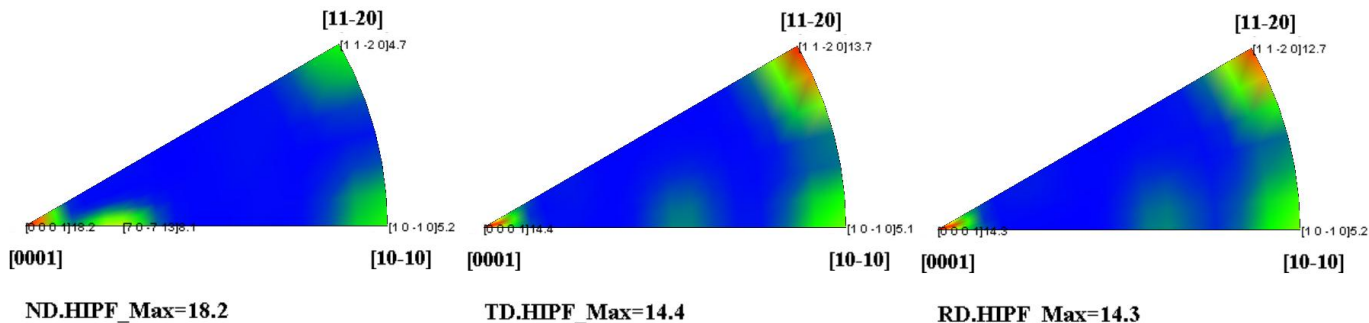


7. Hexagonal 比較

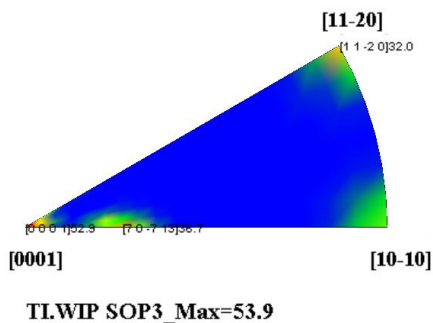
LaboTex



TexTools

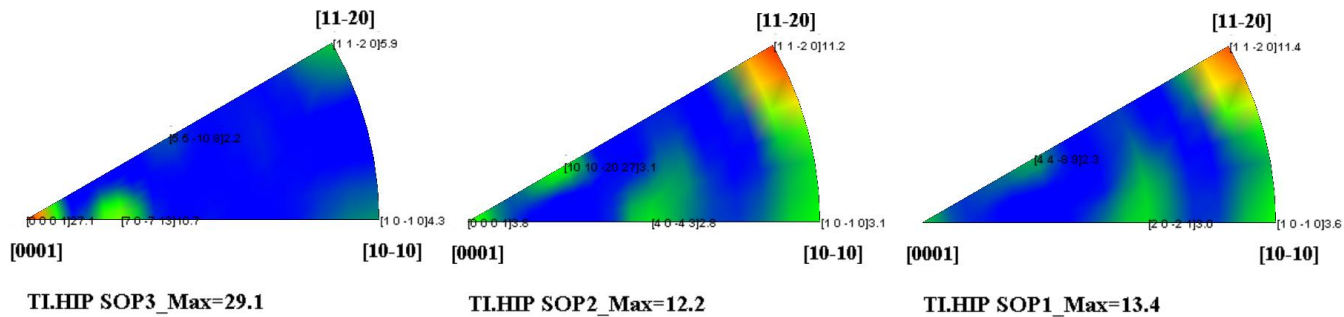


popLA(WIMV)



TD, RD は計算結果が大きすぎるため
読み込めません。

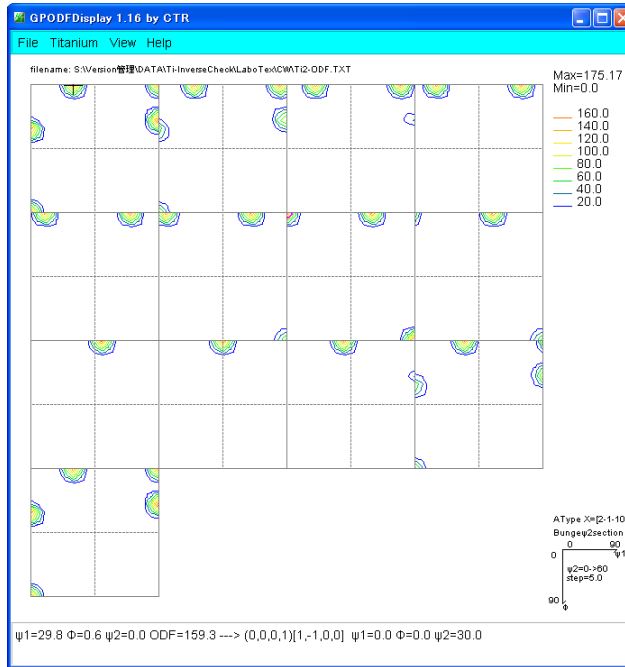
popLA(Hermonic)



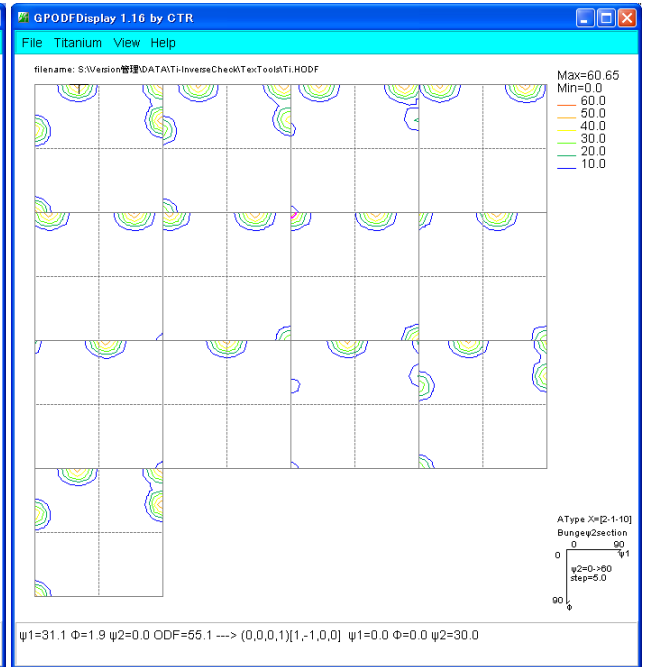
popLA の WIMV 計算密度が高く、決められたサイズの TXT データで表現出来なく、読み込み出来ない方位密度が低いのもでは問題ない

ODF 図の比較

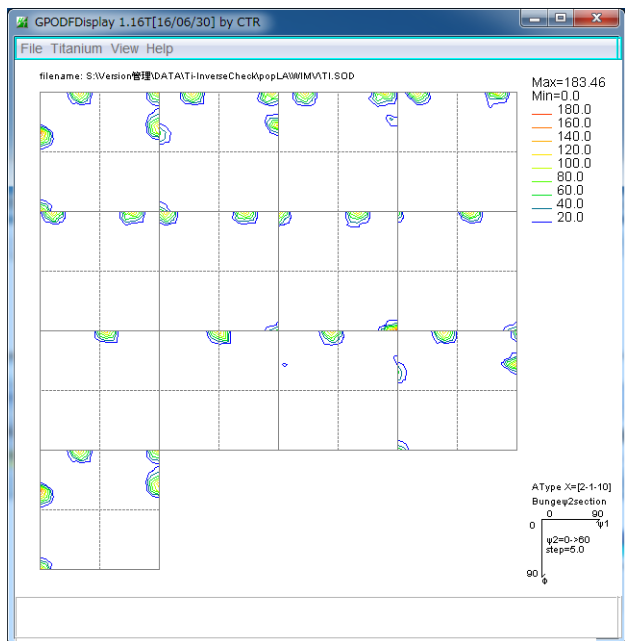
LaboTex



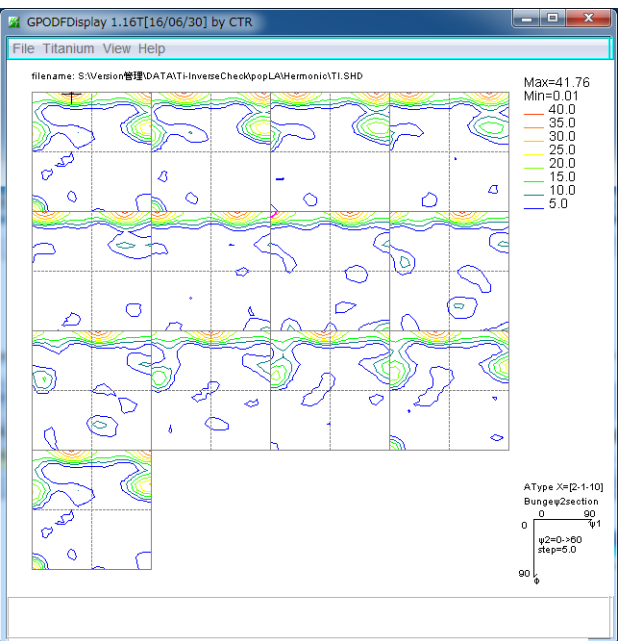
TexTools



popLA(WIMV)

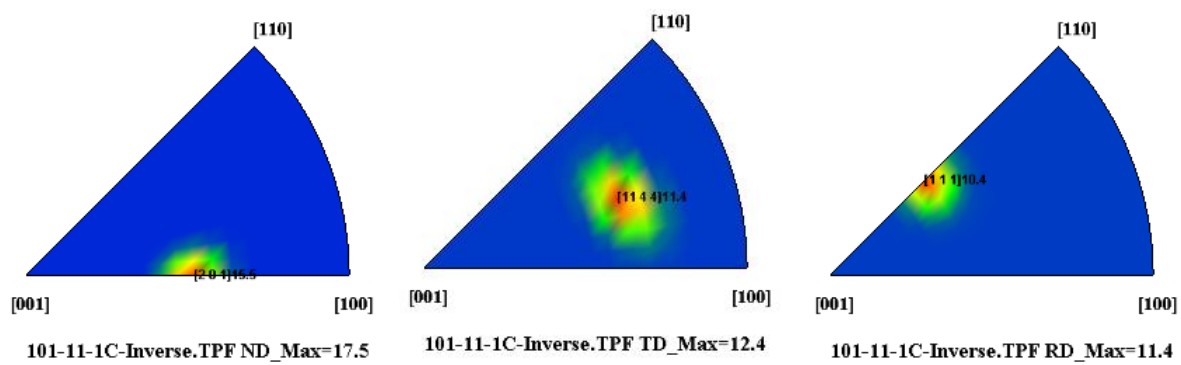


popLA(Hermonic)

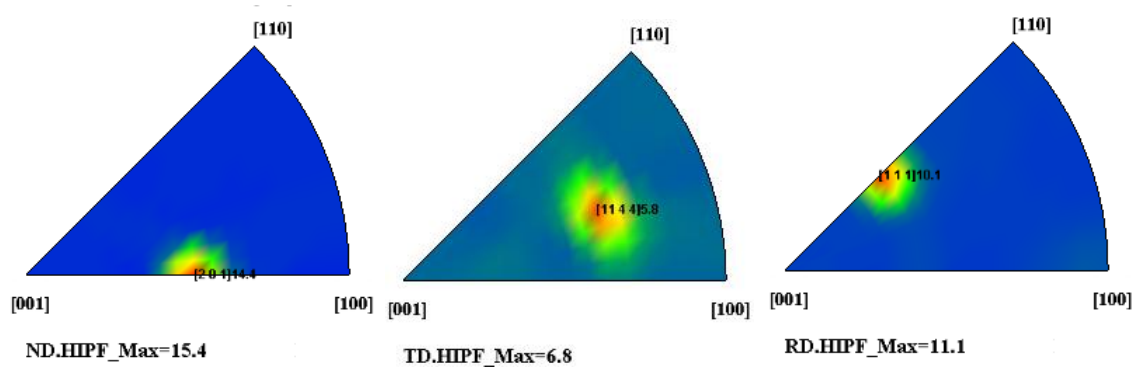


8. Tetragonal (Nd₂Fe₁₄B) の場合

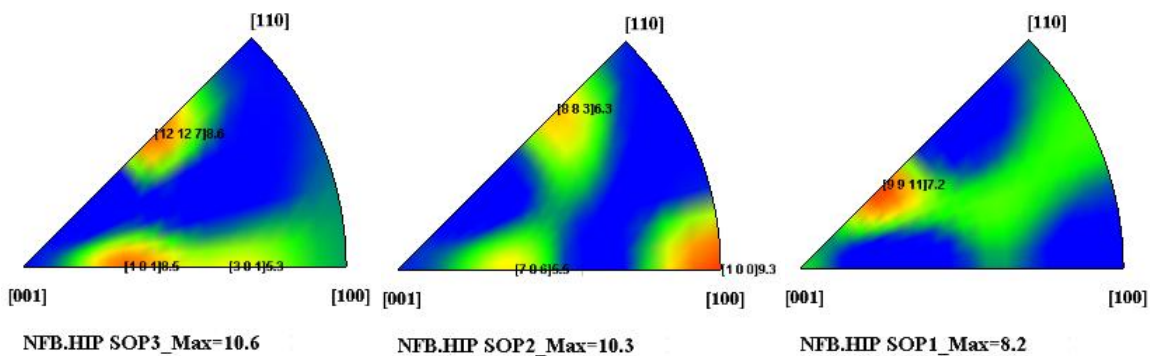
LaboTex



TexTools



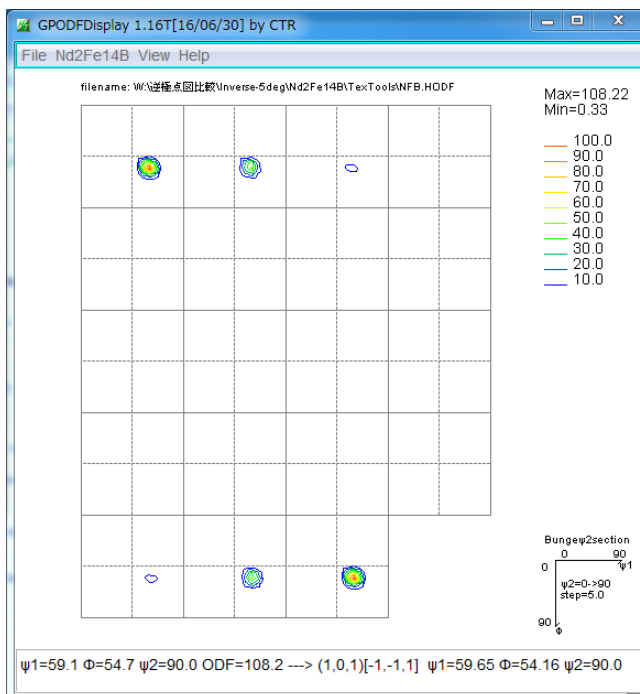
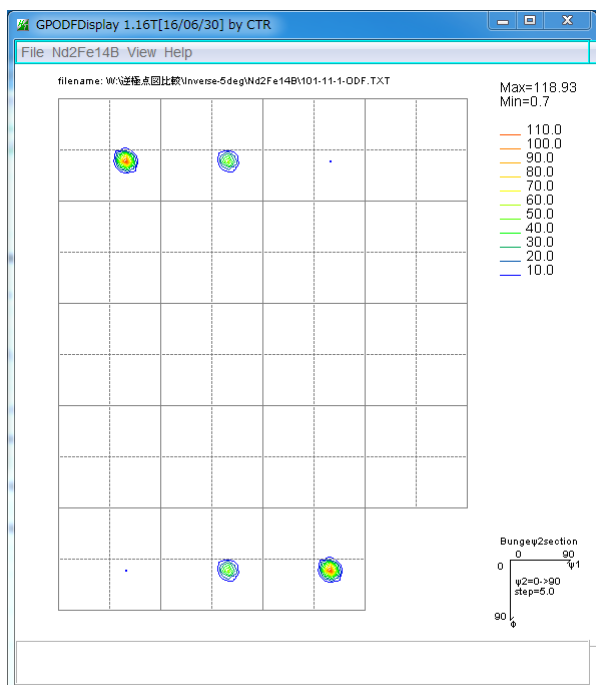
popLA(Hermonic)



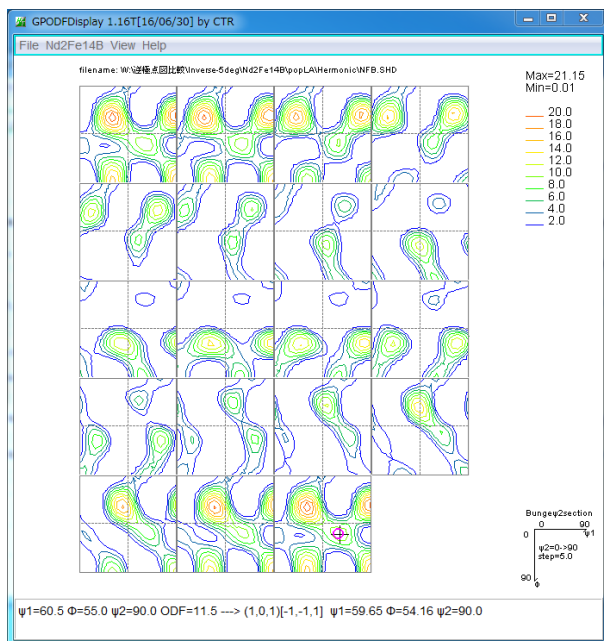
popLA(WIMV)は、極点図7個必要で非現実的

Tetragonal (Nd₂Fe₁₄B) の ODF
LaboTex

TexTools



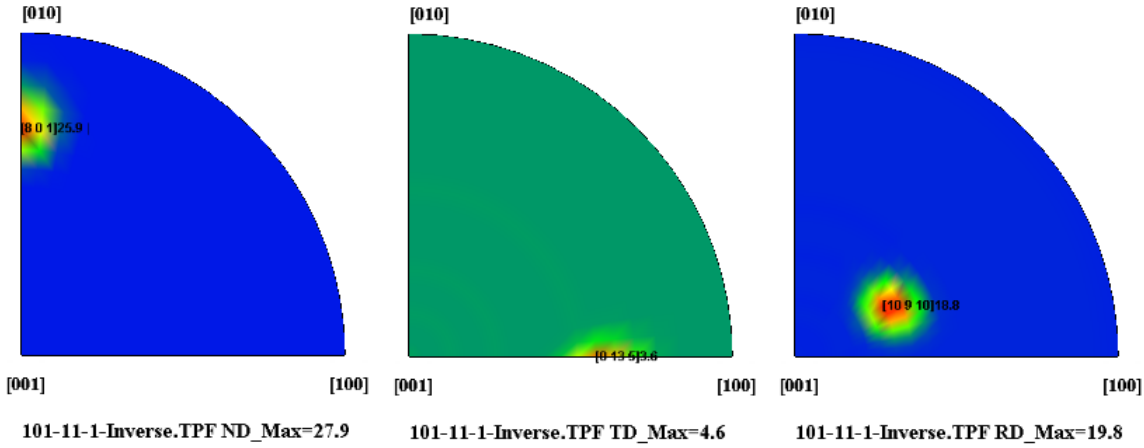
popLA(Hermonic)



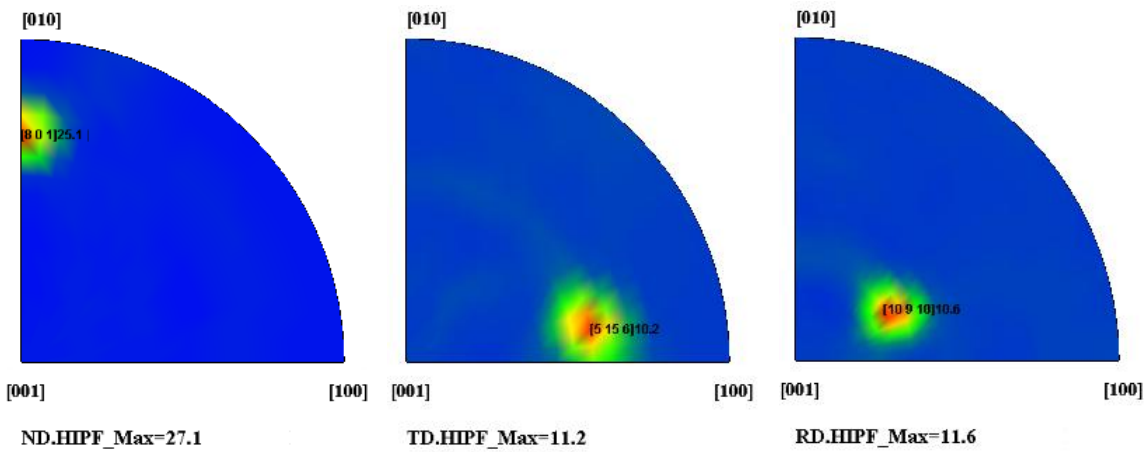
popLA(Hermonic)では、極点図3個では解析できていない。

9. Orthorhombic (PE) の場合

LaboTex

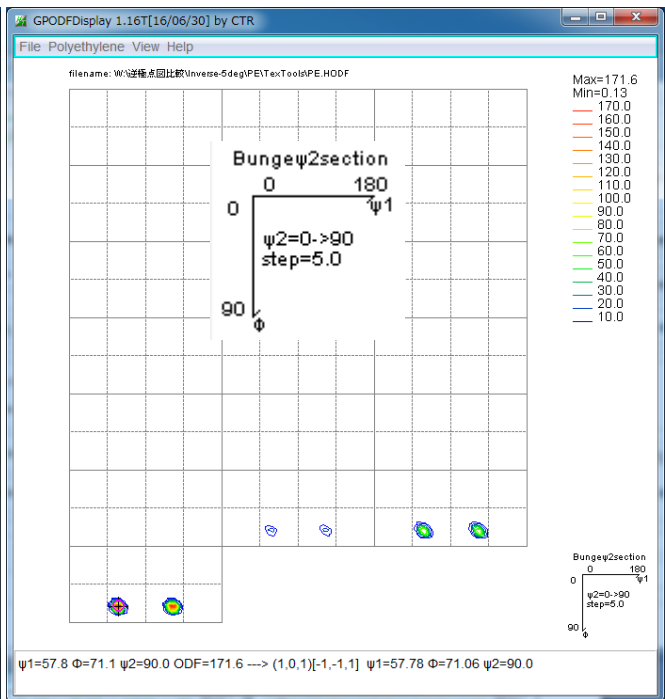
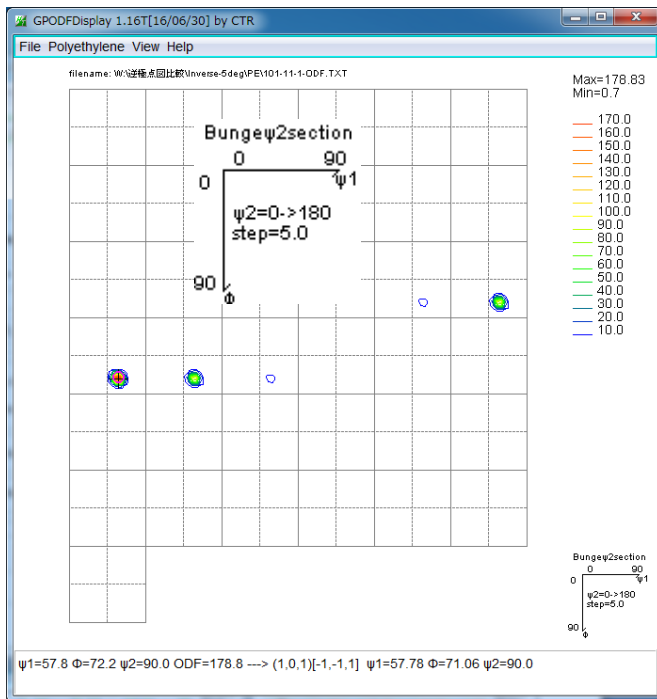


TexTools



LaboTexODF

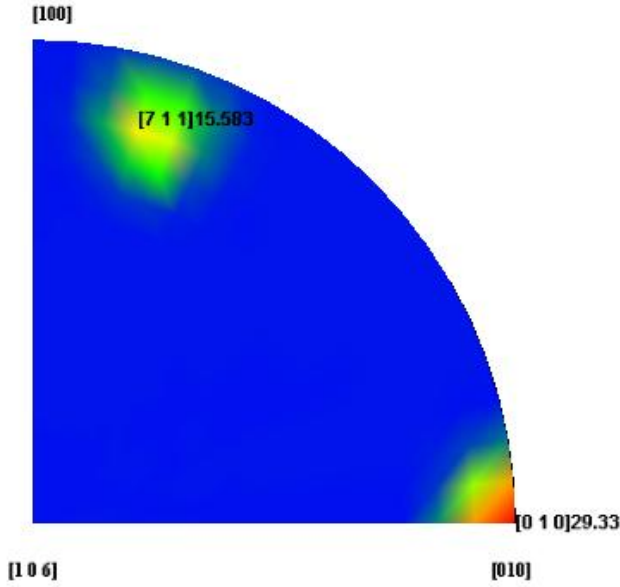
TexTools の ODF



psi1=57.8 phi=72.2 psi2=90.0 ODF=178.8 ----> (1,0,1)[-1,-1,1] psi1=57.78 phi=71.06 psi2=90.0 psi1=57.8 phi=71.1 psi2=90.0 ODF=171.6 ----> (1,0,1)[-1,-1,1] psi1=57.78 phi=71.06 psi2=90.0

10. Monoclinic (PP)

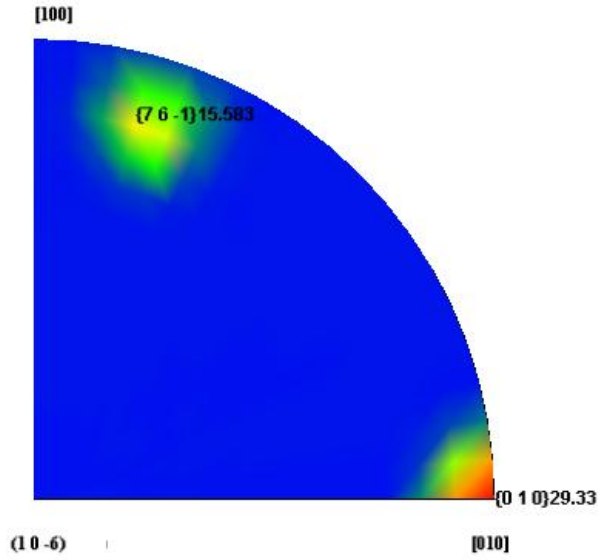
Direction



ND.HIPF_Max=29.3

[0 1 0] 90.0 90.0 29.33 90.0 0.0
 [7 1 1] 81.377 15.0 15.583 81.377 75.0

Plane



ND.HIPF_Max=29.3

{0 1 0} 90.0 90.0 29.33 90.0 0.0
 {7 6 -1} 81.377 15.0 15.583 81.377 75.0

InverseDirection 1.13MT[17/03/31] by CTR

File Help

Max index: 7
 Method: Direction
 Material: α-Polypropylene.txt
 φ: 81.337 β: 15 [Calc] Center[001]

81.337 15.0 --> [7 1 1]

Direction
 u: 7 v: 1 w: 1 [Calc]
 u: 1 v: 1 t: -2 w: 0 [Calc]

Plane
 Max index: 7 81.337 15.0 --> (7 6 -1)

Inverse center: [1 0 6]

InverseDirection 1.13MT[17/03/31] by CTR

File Help

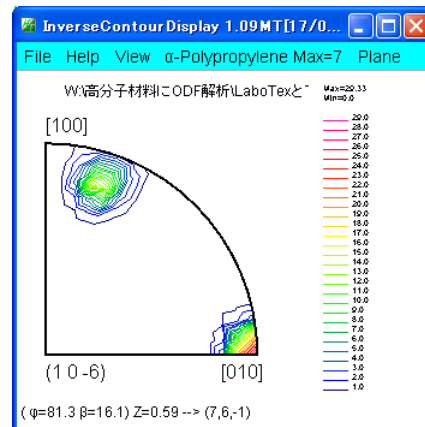
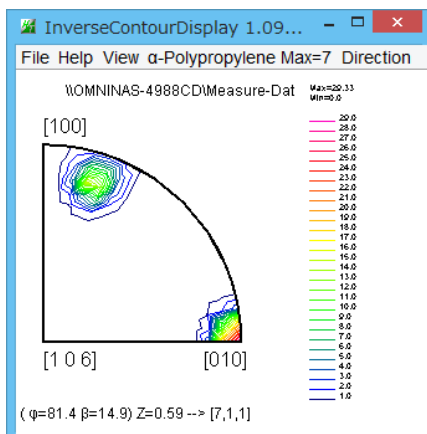
Max index: 7
 Method: Plane
 Material: α-Polypropylene.txt
 φ: 81.337 β: 15 [Calc] Center[001]

81.337 15.0 --> (7 6 -1)

Plane
 h: 7 k: 6 l: -1 [Calc]
 h: 1 k: 1 t: -2 l: 0 [Calc]

Direction
 Max index: 7 81.337 15.0 --> [7 1 1]

Inverse center: (1 0 -6)



計算されるミラー指数は、最大指数値設定で異なります。

11. MTEX対策

MTEXでは逆極点図のExportがなし、以下のm関数でExportする

```
MTEX exportIPDF
```

```
function exportIPDF(odf,r,filename)
```

```
% export inverse pole figure file
```

```
% 2018/02/17
```

```
% Syntax
```

```
% export(odf,r,'inverse.TXT')
```

```
%
```

```
% input
```

```
% odf - @ODF
```

```
% r - @vector3d specimen direction
```

```
% filename
```

```
% output
```

```
% filename inverse dataes
```

```
%
```

```
% get fundamental sector for the inverse pole figure
```

```
sR = fundamentalSector(odf.CS);
```

```
% plotting grid
```

```
h=plotS2Grid(sR);
```

```
% compute inverse pole figures
```

```
p = ensureNonNeg(odf.calcPDF(h,r));
```

```
% output file open
```

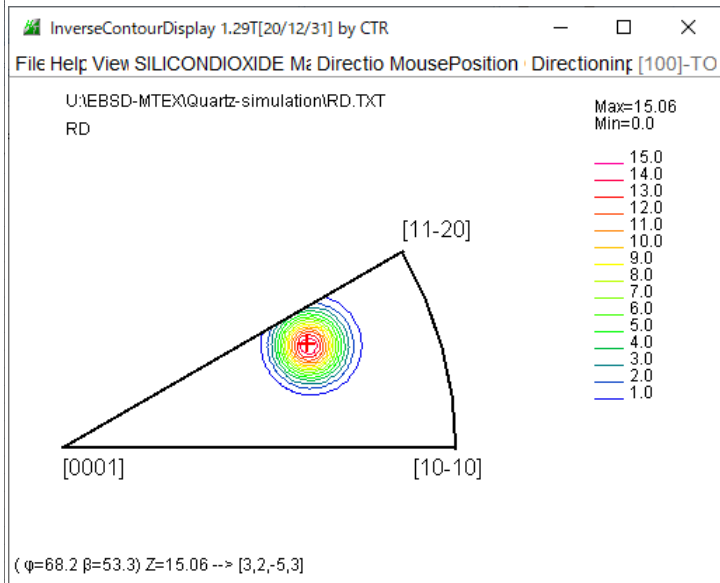
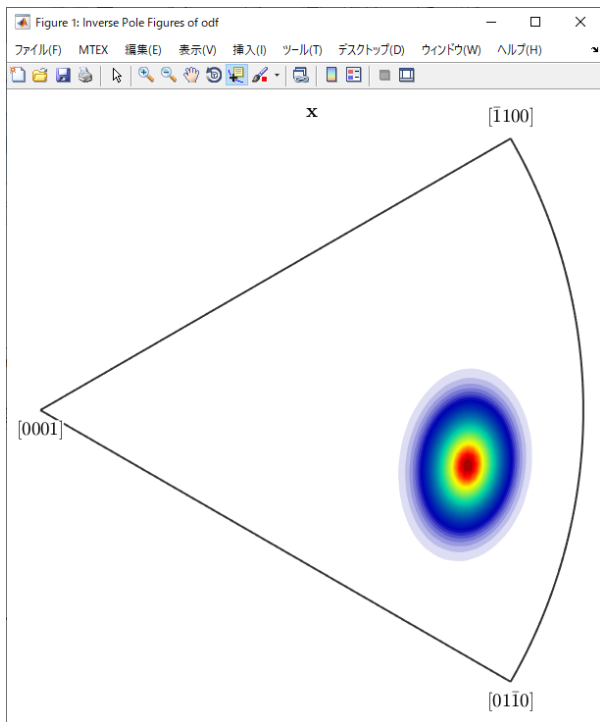
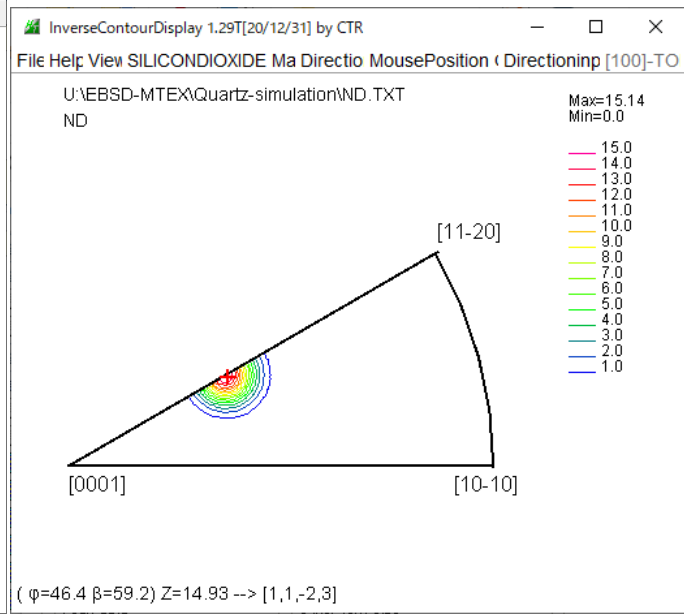
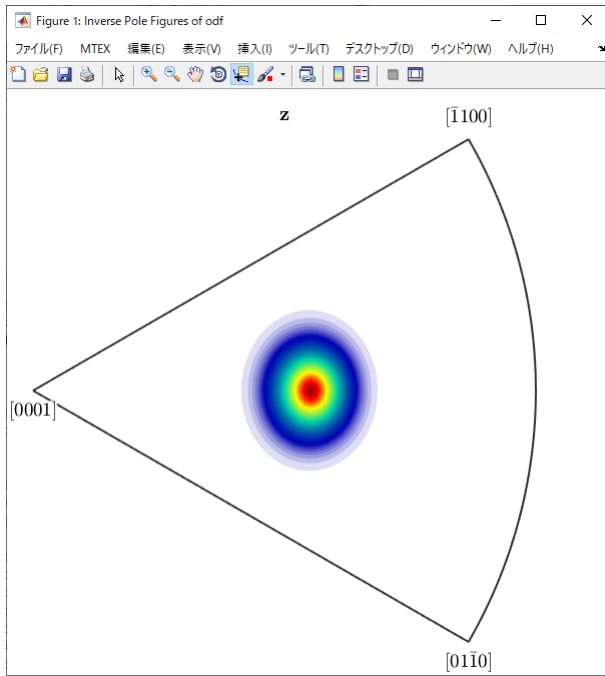
```
fid=fopen(filename,'wt');
```

```
% data output
```

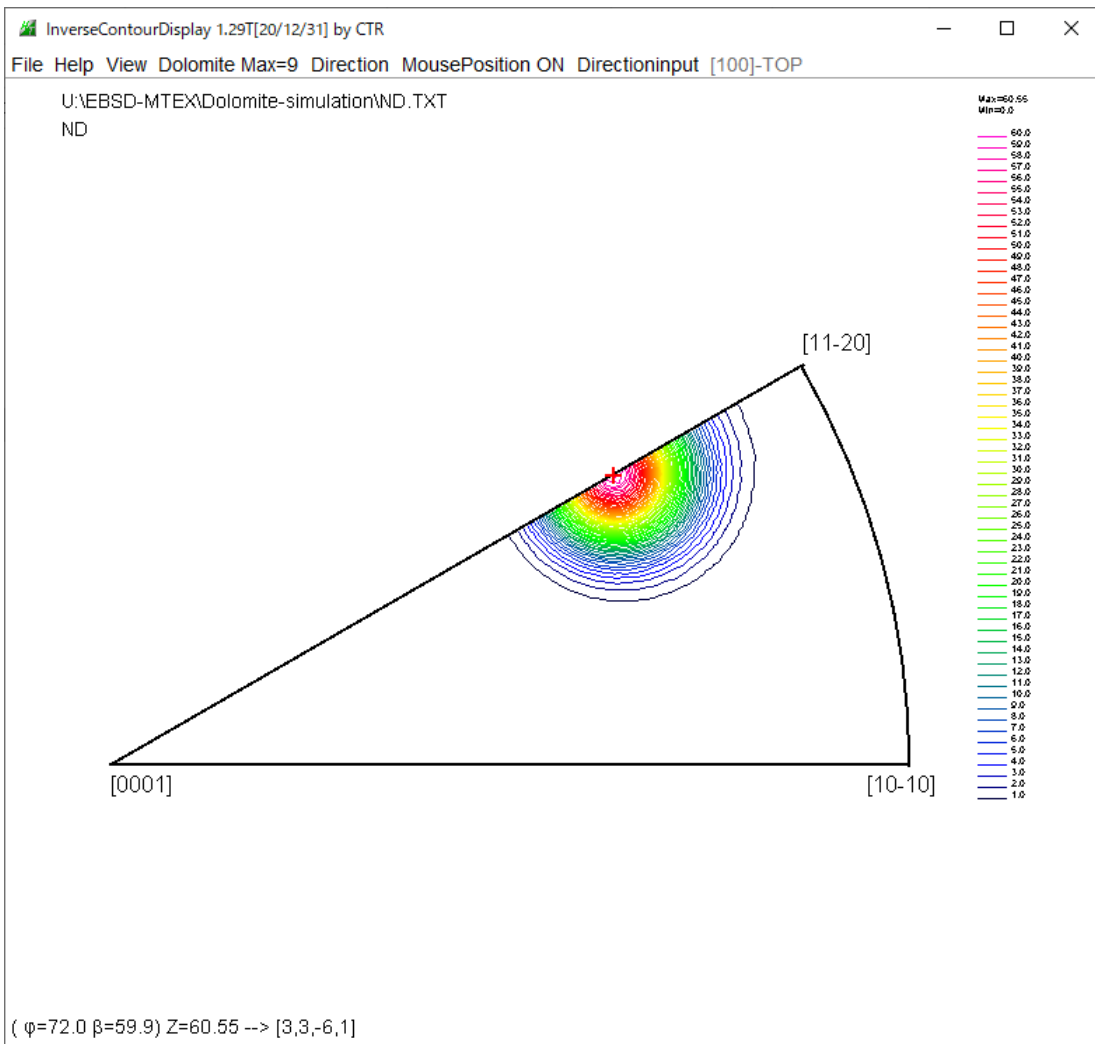
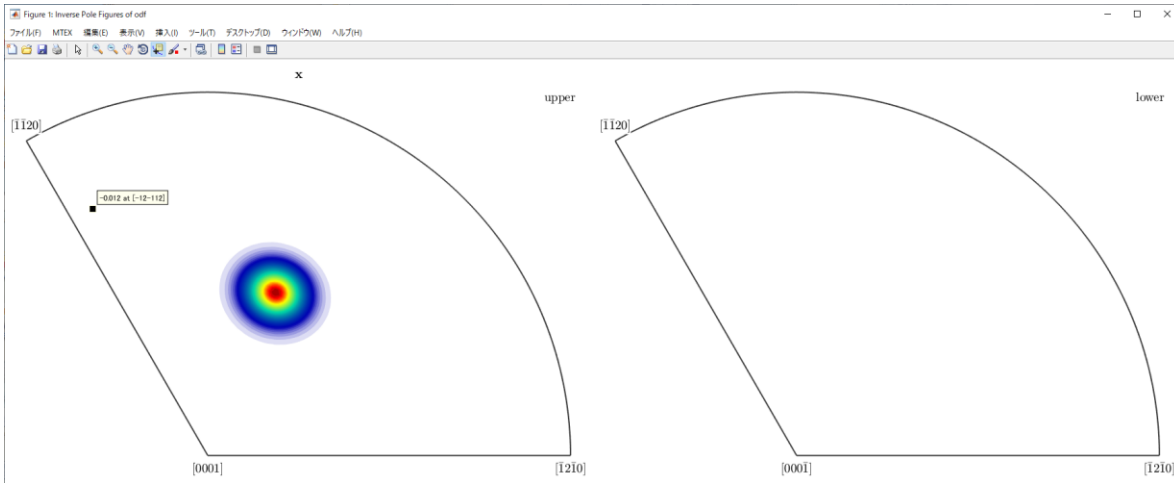
```
fprintf(fid,'%5d¥n',p);
```

```
fclose(fid);
```

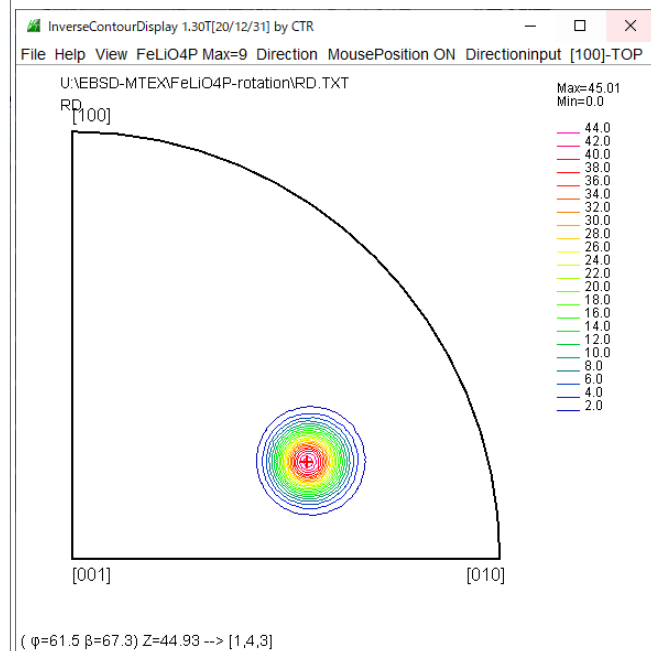
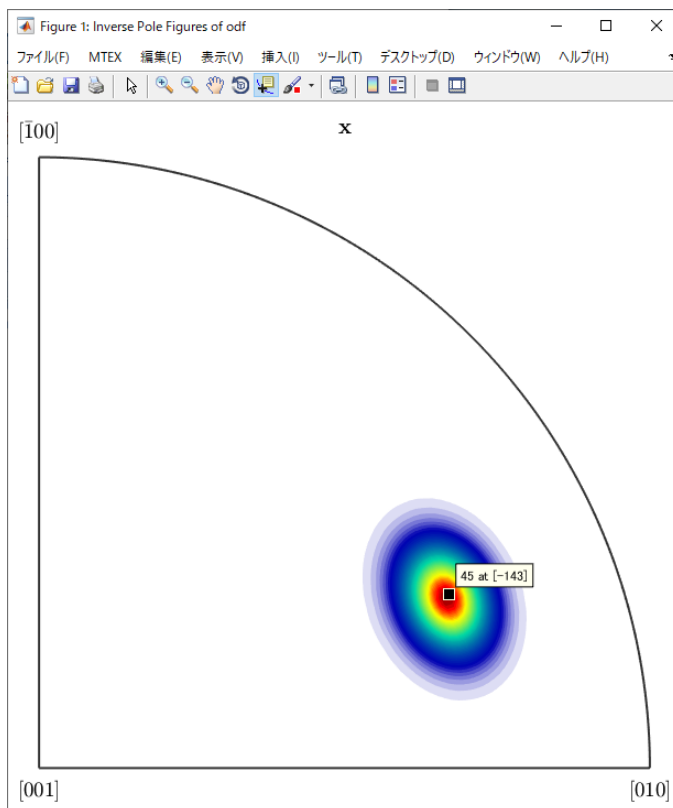
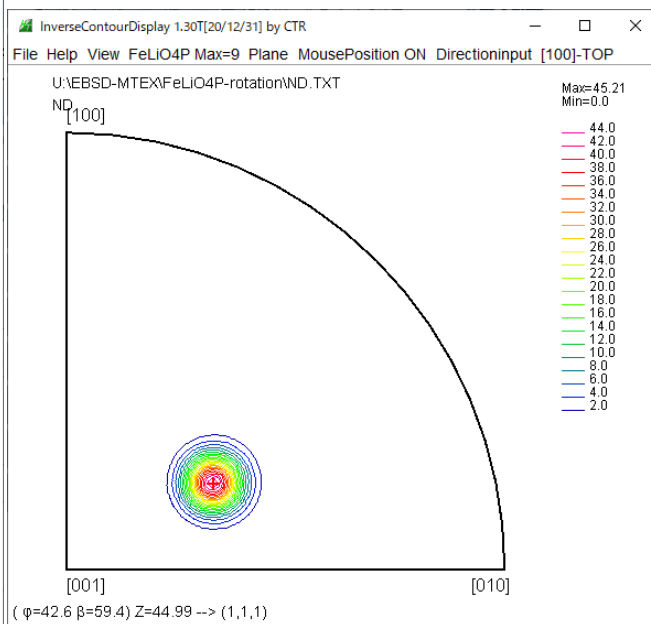
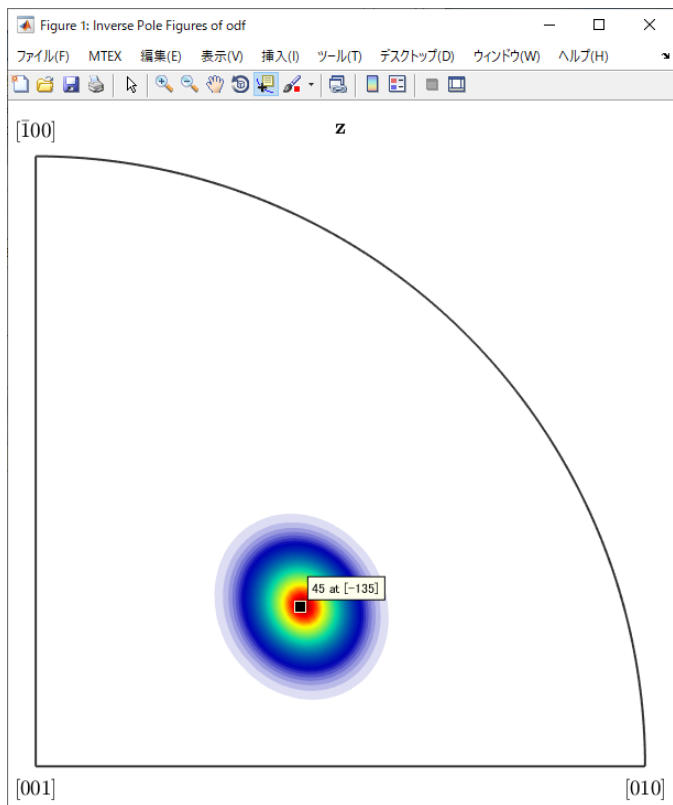
E B S D - M T E X - Q u a r t z の解析結果 (Hexagonal-D6)



EBS D-MTEX-Dolomiteの解析結果 (Hexagonal-D6)



Orthorhombicリチウム正極材LiFePO₄



Tetragonal 超電導材 LaFePO 材

