

H e x a t o C u b i c ソフトウェア

Ver.1.01

2021年12月21日

HelperTex Office

概要

HCPのシュミット因子を計算する場合、Hexagonalのまま計算すると混同する。
対策として、Cubicに方位変換しCubicとしてSchmid因子計算が簡単である。

Hexagonal→Cubic変換

金属、Vol. 69 (1999) NO. 1 「チタンおよびチタン金属の集合組織」 井上博史
P. 31

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a/c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ i \\ l \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c/a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ t \\ w \end{pmatrix}$$

による。

付属のSchmid因子計算は

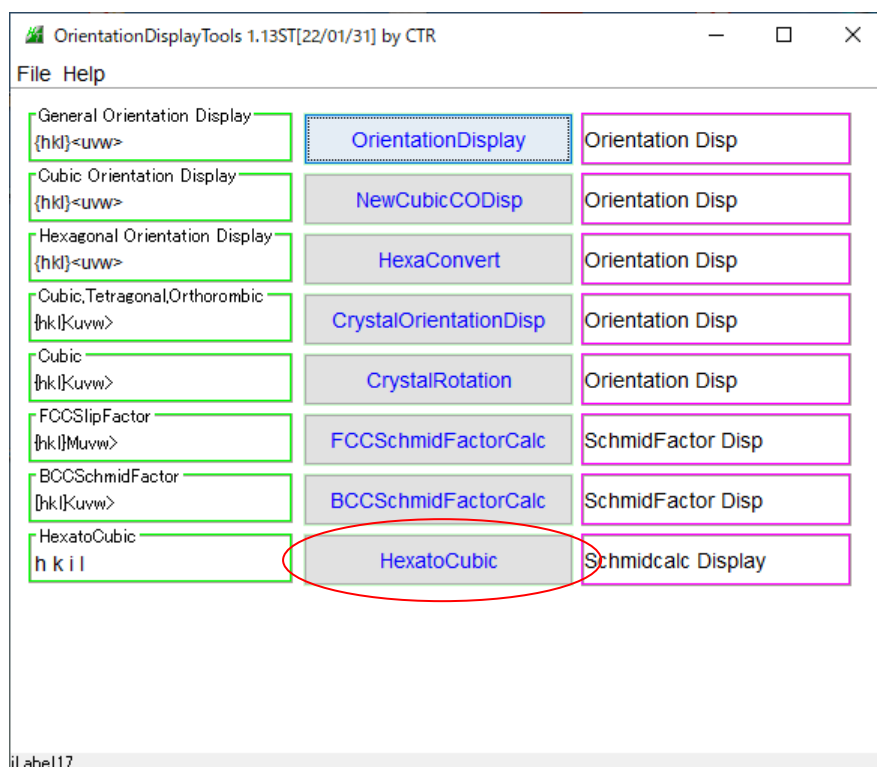
$$\cos \lambda = \vec{F} \vec{n} / (|\vec{F}| |\vec{n}|)$$

$$\cos \phi = \vec{F} \vec{d} / (|\vec{F}| |\vec{d}|)$$

で計算を行う。

プログラムの起動

ODFPoleFigureのToolKitからOrientationDisplayTools



操作方法

c/a を入力する

あるいはMaterialからHexagonal材料を選択

$\{h k i l\} \langle u v t w \rangle$ を入力しtoCubicで変換する

HexatoCubic 1.01T[22/03/31] by CTR

File Help

HexagonalMaterial

Material 1.6234

Slip System

h k i l 0 0 0 1

u v t w 1 1 -2 0 toCubic

h k i l 3 3 -6 8 toCubic

cosφ Schmid

cosλ

SchmidFactor

Hexagonal 4 指数入力から、toCubicでCubic 3 指数に変換する。

Slip Systemを意識しないで使用すれば一般的な変換に利用できます。

付属の S c h m i d 因子計算

HexatoCubic 1.01T[22/03/31] by CTR

File Help

HexagonalMaterial

Material: 1.6234

Slip System

h k i l: 0 0 0 1 0.0 0.0 1.0 -> 0 0 1

u v t w: 1 1 -2 0 0.86603 0.5 0.0 -> 12 7 0

toCubic

h k i l: 8 8 -16 15 0.74995 0.43299 0.50009 -> 12 7 8

toCubic

cosφ= 0.5001

cosλ= 0.866

SchmidFactor= 0.4331

Schmid

S c h m i d 計算では、C u b i c 指数を整数化しないで計算

M T E X では、3 指数を入力する。s l i p 方位を 4 指数から 3 指数に変換(Type-B)

HexaConvert 1.11ST[22/01/31] by CTR

File Step Help

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

Miller Notation (3 Axis Notation)

☐ 0 0 1 1 1 0

Miller Bravais Notation (4 Axis Notation)

☒ 0 0 0 1 1 1 -2 0

Euler(p1p2)

☐ 0.0 0.0 30.0

Material select

Magnesium.TXT

c/a: 1.624 Input ψ2 Angles: 30.0

Calc

DISP

Position: 10 Disp size: 200

BG Corr: Black Line size: 1.0

DISP MINUS

OK Return Structure

H E x a C o n v e r t ソフトウェア

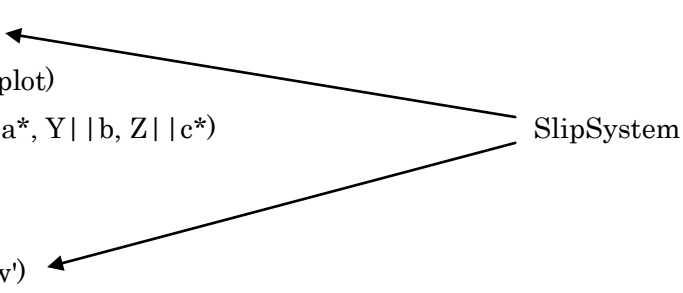
4 指数<-> 3 指数

X-Axis [2-1-10]<->[10-10]

指数<->euler 角度変換

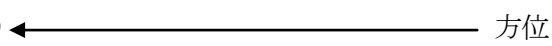
```
>> CS = crystalSymmetry('hexagonal',[1,1,1.6235],'mineral','MG')
CS = crystalSymmetry (show methods, plot)
    mineral      : MG
    symmetry     : 6/mmm
    elements     : 24
    a, b, c      : 1, 1, 1.6
    reference frame: X | a*, Y | b, Z | c*
>> n = Miller(0,0,1,CS,'hkl')
n = Miller (show methods, plot)
mineral: MG (6/mmm, X | a*, Y | b, Z | c*)
h k l
0 0 1
>> d = Miller(1,1,0,CS,'uvw')

d = Miller (show methods, plot)
mineral: MG (6/mmm, X | a*, Y | b, Z | c*)
u v w
1 1 0
```



計算を行う方位を入力

```
>> r = normalize(vector3d(12,7,8))
r = vector3d (show methods, plot)
    x      y      z
0.748539 0.436648 0.499026
>> sS = slipSystem(d,n)
sS.SchmidFactor(r)
sS = slipSystem (show methods, plot)
mineral: MG (6/mmm, X | a*, Y | b, Z | c*)
size: 1 x 1
    U    V    T    W | H    K    I    L CRSS
    1    1   -2    0  0    0    0    1    1
ans =
    0.4324
```



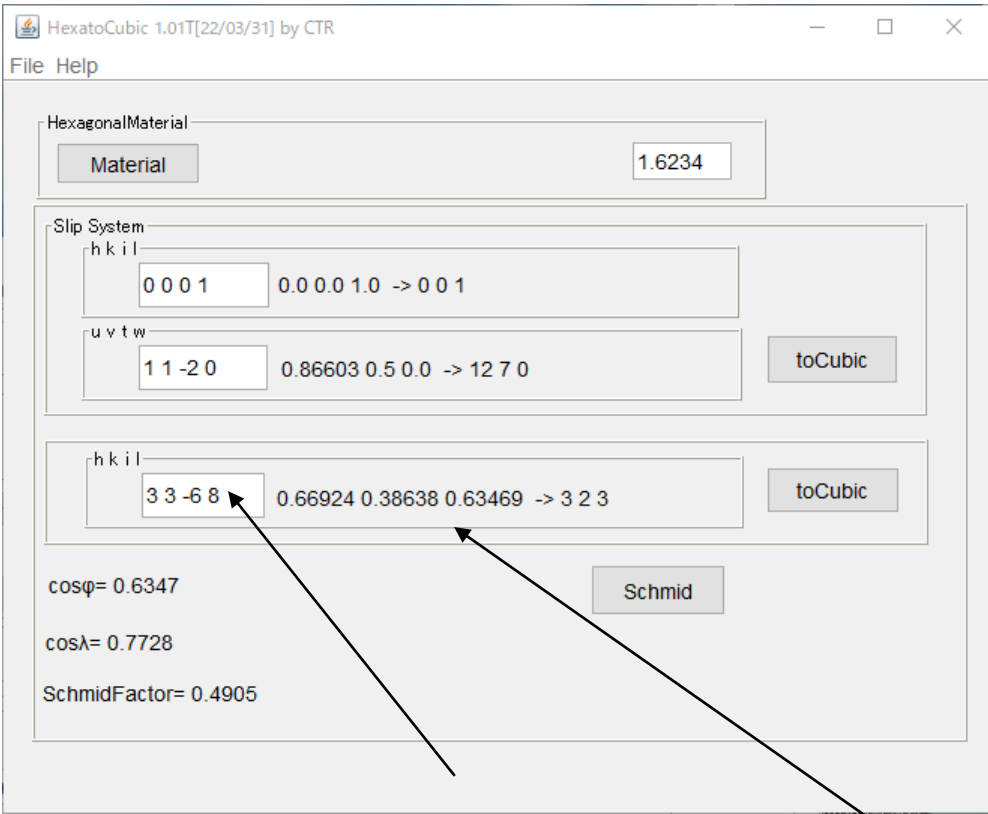
小数点2桁まで一致する。

MTEX

MATLAB 化で操作する Free-ODF (XRD,EBSD)

PlaneとDirection

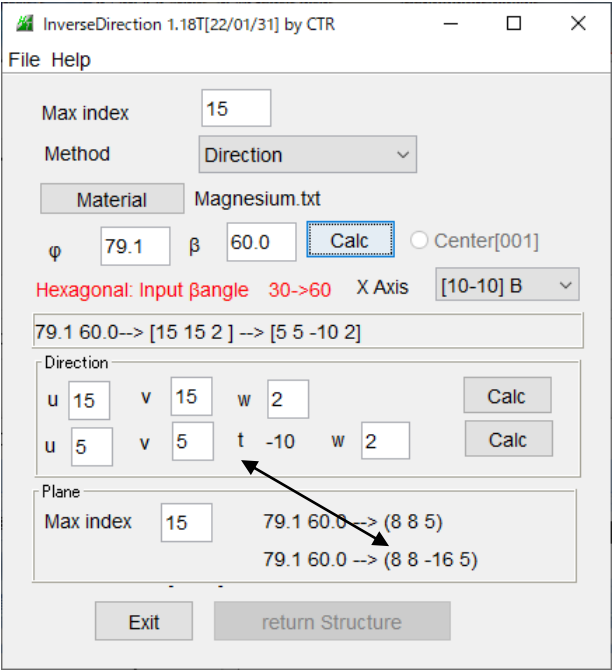
Cubicでは、Plane=Directionであるが、Hexagonalでは一致しません。
HCPを扱う場合注意が必要です。



HexagonalのPlaneを入力

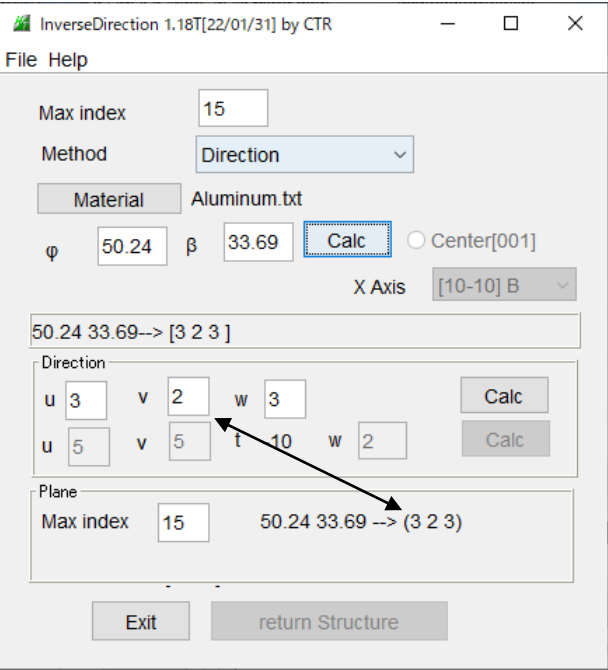
CubicのPlane=Direction

Hexagonal



HexagonalはPlaneとDirectionは一致しない

Cubic



Cubicは一致する

マグネシウムの $\{0001\} \langle 11-20 \rangle$ Slip System

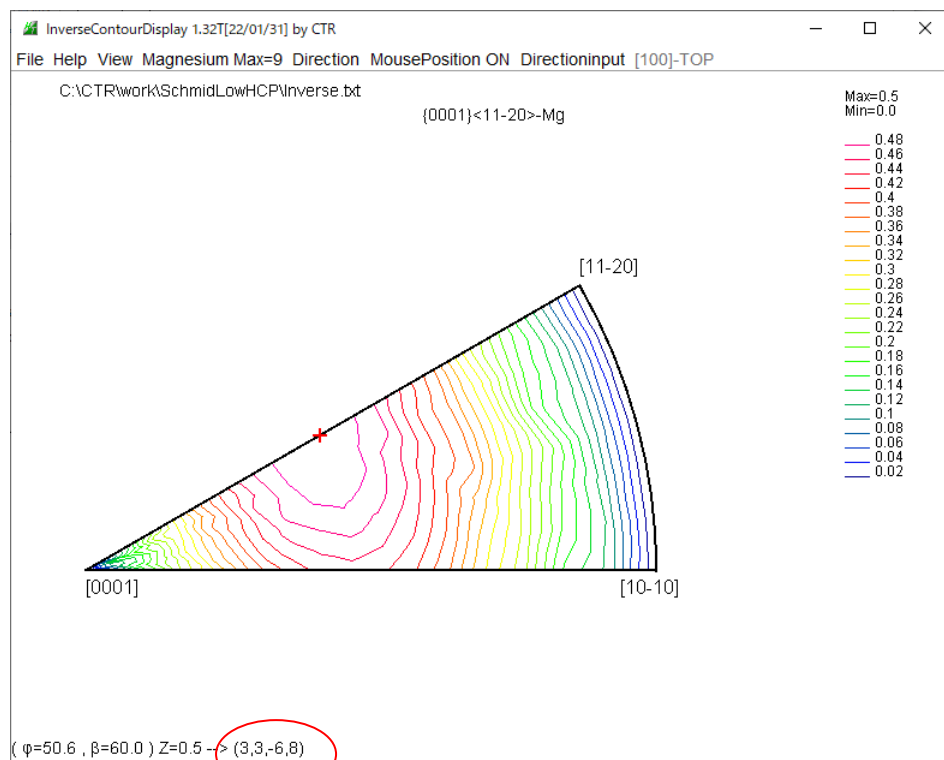
Slip Systems

☒ $\{0001\} \langle 11-20 \rangle$ ☐ $\{01-10\} \langle 2-1-10 \rangle$ ☐ $\{-1101\} \langle 2-1-13 \rangle$ ☐ $\{-2112\} \langle 2-1-13 \rangle$

Inverse

同一角度における Plane と Direction

Plane



Direction

