

Tetragonal, Orthorhombic, Hexagonalのための逆極点表示

InverseContourDisplayソフトウェア

Ver1.37A

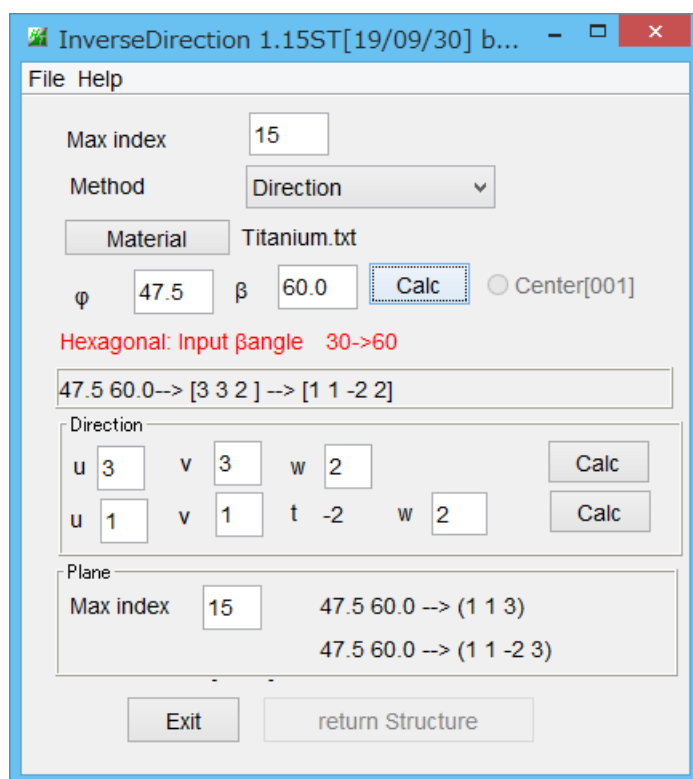
Tetragonal, Orthorhombic, Hexagonal, Monoclinic の LaboTex, TexTools 逆極点データに対し方位(Direction)、面(Plane)計算すると、LaboTex, TexTools の逆極点データは一致します。

popLA では、Hexagonal は一致する。

等高線描画上では極の位置が鮮明になり、手動で正確に確認出来ます。

この結果は、InverseDirection ソフトウェアでも確認出来ます。

GPIInverseDisplay、InverseCubicDisplay、InverseDirection ソフトウェアで強力な逆極点解析ツールが揃いました。



2023年01月23日

HelperTex Office

- 2016/11/10 Hexagonal バグ修正
- 2019/02/14 等高線見直し
- 2019/06/20 Ver1.25 カウスクリック位置に+マークと方位計算
方位の手入力
- 2020/08/23 Ver1.26 Orthorhombic の[100]を Top から Right に変更
- 2020/08/24 Ver1.28 Orthorhombic,Hexagonal 複数角度方位入力のサポート
- 2020/10/31 Ver1.30 Orthorhombic [100]-top で密度が追隨していない
Tetragonal に対応
- 2022/12/16 Ver1.33 Max<1.0 の場合 syep=0.01 に変更、EDITStep0.001 に対応

1. 概要
2. `InverseContourDisplay`ソフトウェアの使い方
 2. 1 データフォーマット
 2. 2 材料の選択
 2. 3 方位計算の最大指数の指定 (3指数)
 2. 4 指数計算の`Direction` ↔ `Plane`変更
3. `Hexagonal`の場合
 3. 1 `LaboTex`
 3. 2 `TexTools`
 3. 3 `popLA`
4. `Tetragonal`の場合
 4. 1 `LaboTex`
 4. 2 `TexTools`
5. `Orthorombic`の場合
 5. 1 `LaboTex`
 5. 2 `TexTools`
6. `Monoclinic`の場合
 6. 1 `TexTools`
7. 複数角度入力サポート (`Cubic`は`InverseCubicContourDisplay`)
 7. 1 `Orthorhombic`
 7. 2 `Hexagonal`
8. `BCCSchmid`因子表示時、回転角度と指数を表示

1. 概要

逆極点図は、CubicとCubic以外では表示法が異なる。

逆極点図は方位(Direction)の分布図であり、Cubicでは方位と面(Plane)が一致するが、Cubic以外では、方位と面は一致しない。

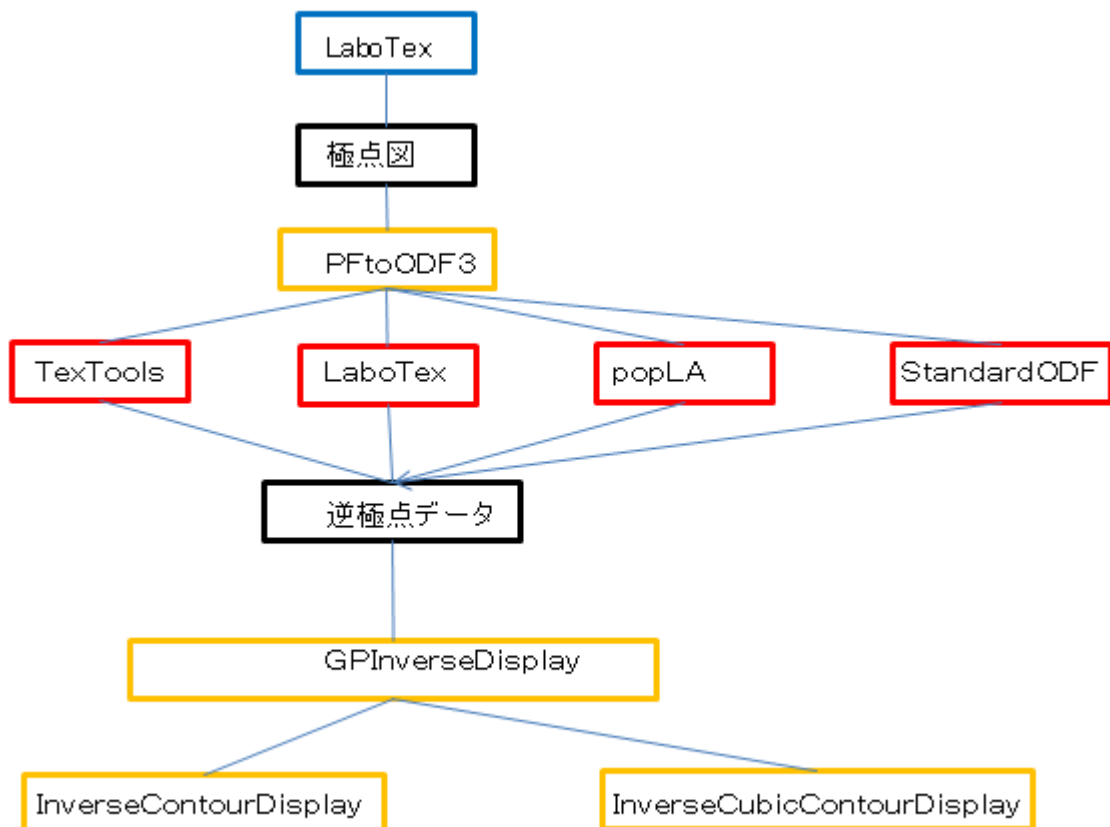
更に、表示する(β 、 ϕ)範囲が異なり、同一ソフトウェアでは実現しにくい為、Cubic以外を本ソフトウェアに纏めてみました。

表示する(β 、 ϕ)の範囲は以下

Cubic	(45, 54)
Tetragonal	(0, 0) → (45, 90)
Orthorhombic	(0, 0) → (90, 90)
Hexagonal	(30, 0) → (60, 90)

説明の都合上、LaboTexで極点図を作成し、極点図をExportし、

LaboTex, TexTools, popLA, StandardODFでODF解析を行いGPInverseDisplayソフトウェアで本ソフトウェアの入力データを作成し比較を行いながら、使用方法を説明します。



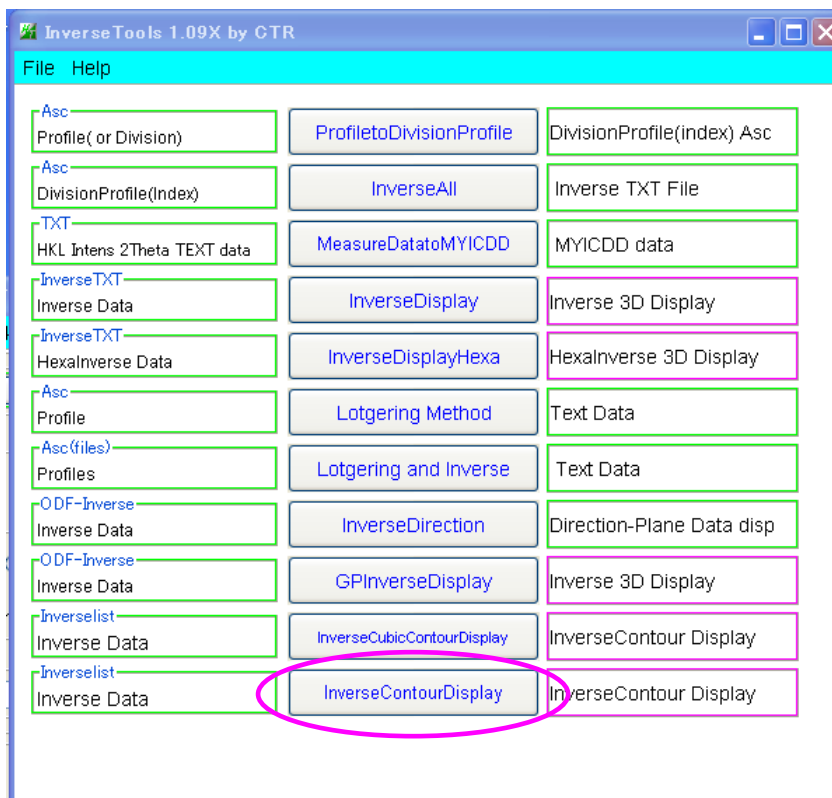
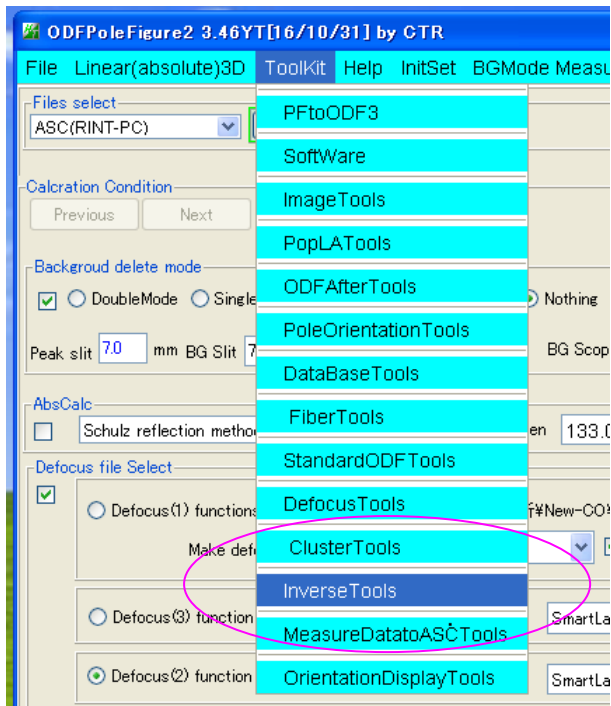
注意：StandardODFはCubicのみ

材料選択に、MaterialData ソフトウェアか、MaterialDataManual ソフトウェアが必要

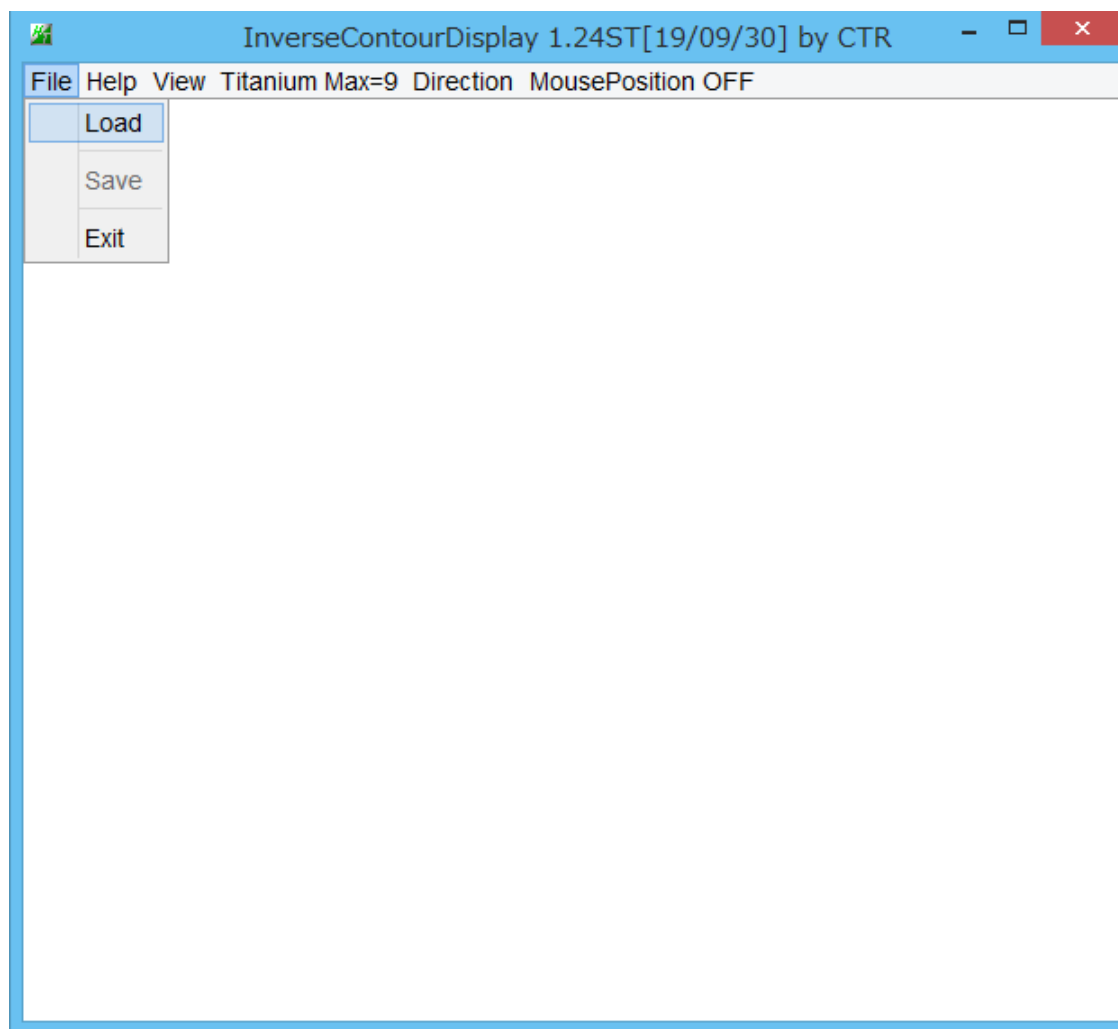
2. InverseContourDisplayの使い方

C:\¥CTR¥bin¥InverseContourDisplay.jar ファイルのダブルクリック

ODFPoleFigure2->ToolKit->InverseTools->InverseContourDisplay



データの入力



2. 1 データフォーマット

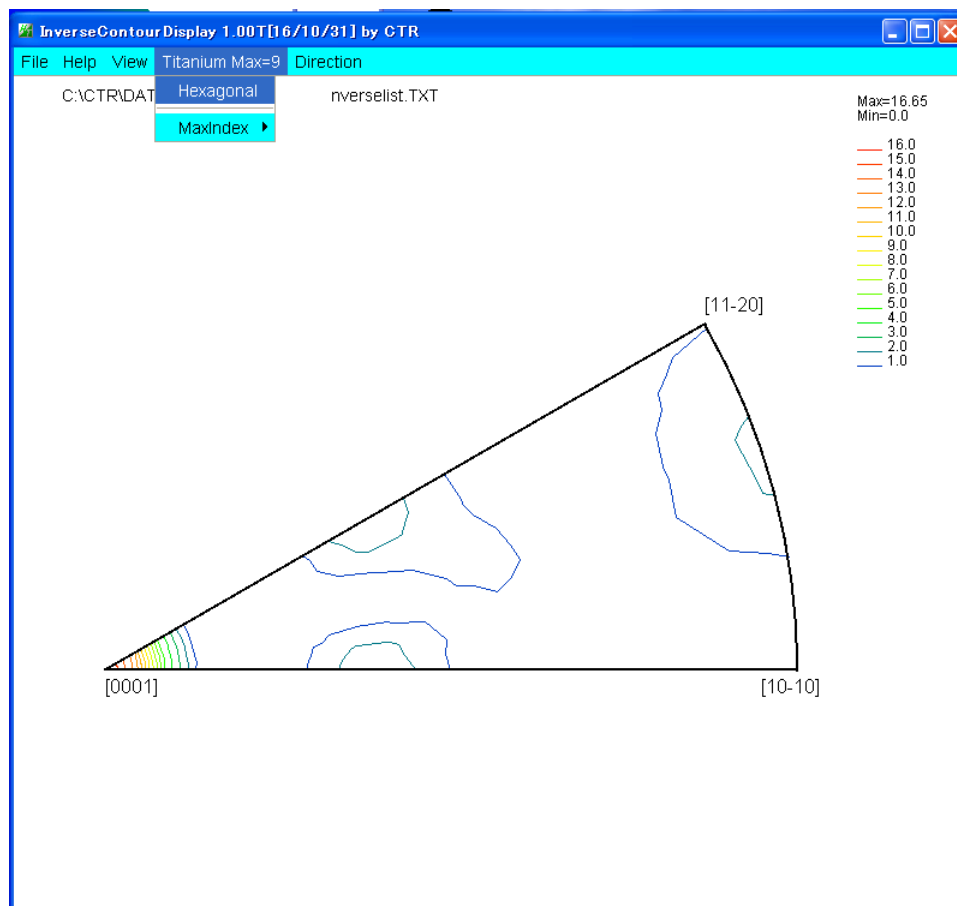
beta	fai	intens
0.0	0.0	16.6531
0.0	5.0	12.786
0.0	10.0	4.898
0.0	15.0	0.8995
0.0	20.0	0.4104
0.0	25.0	0.3761
0.0	30.0	0.2512
0.0	35.0	0.6808
0.0	40.0	1.8556
0.0	45.0	2.7176
0.0	50.0	2.5471

上記フォーマットデータを作成するか、

GPInverseDisplayソフトウェアで上記フォーマットに変換して
ご使用になれます。

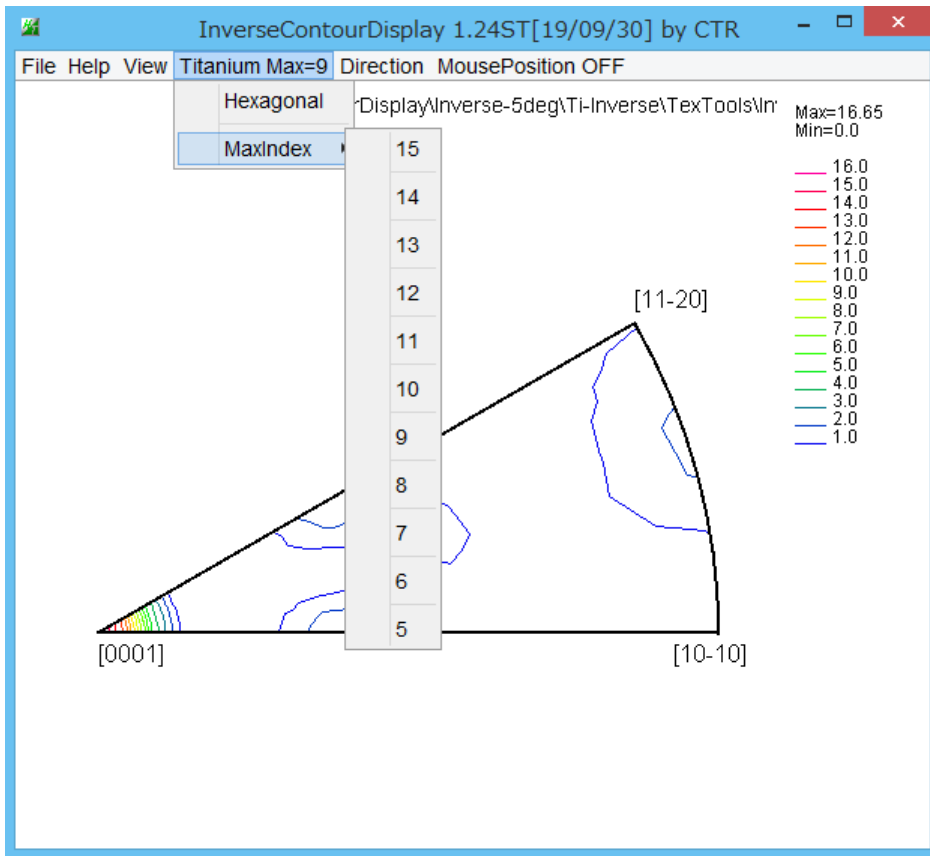
2. 2材料の選択

本ソフトウェアは、Tetragona,Orthorhombic,Hexagonal 用です。



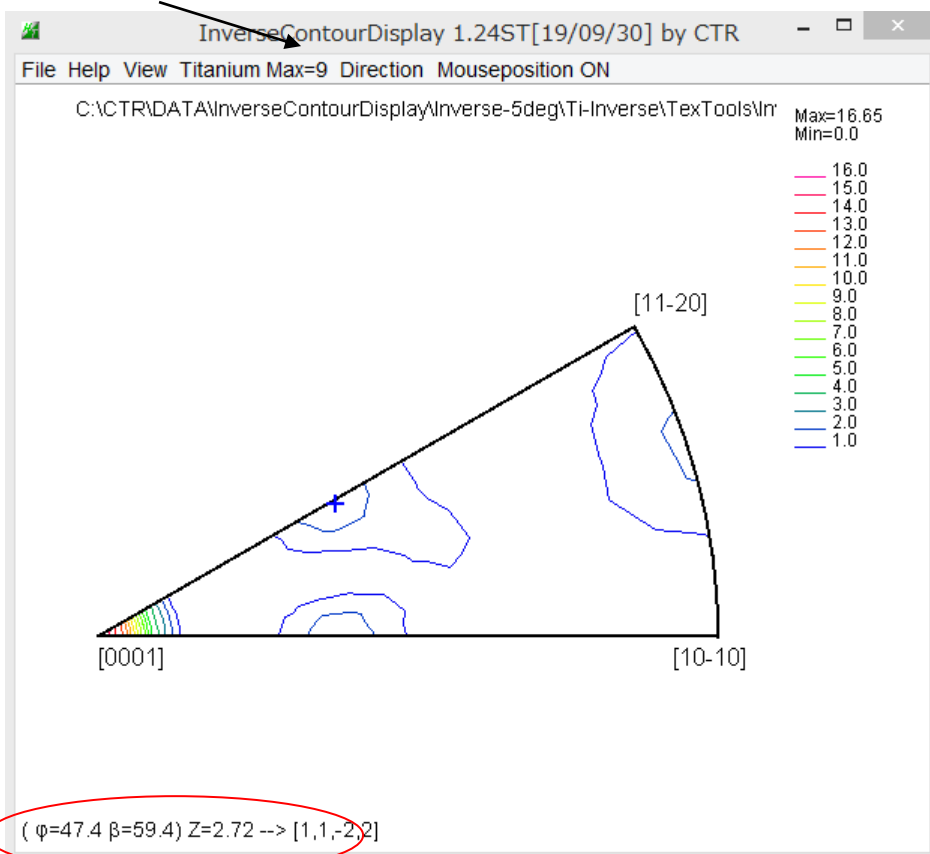
2. 3方位計算の最大指数の指定 (3指数)

Hexagonal では3指数で計算し、4指数変換を行っているため、最大指数を超える事もあります。

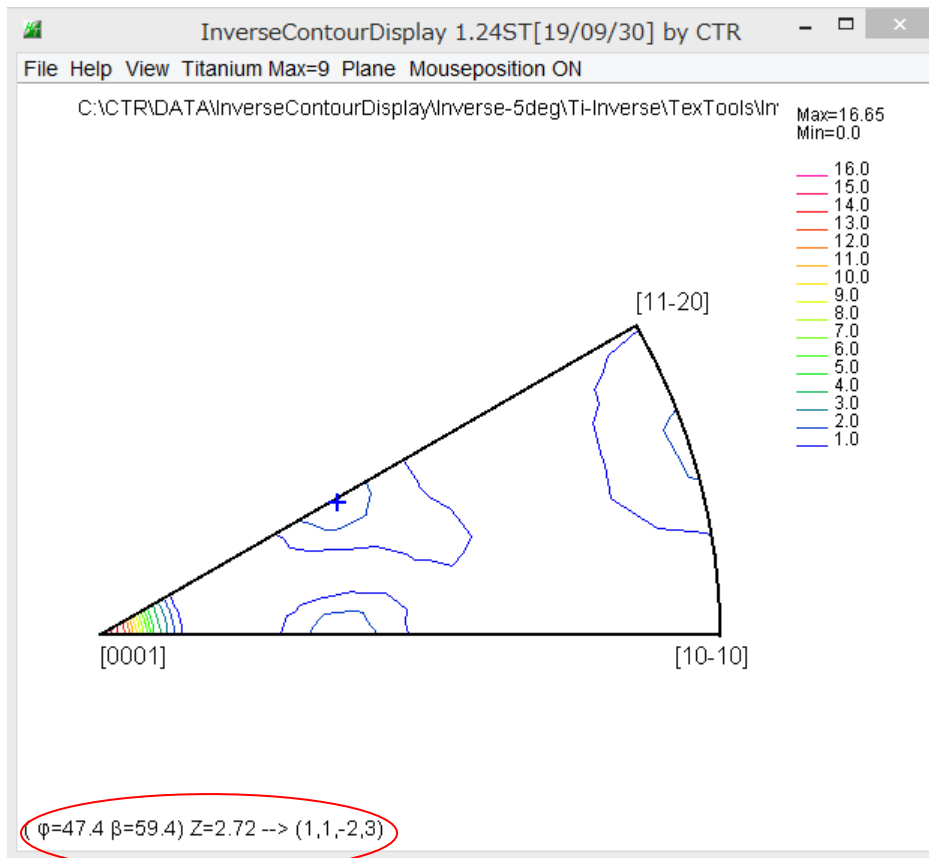


2. 4指数計算のDirection \leftrightarrow Plane 変更

Direction で計算



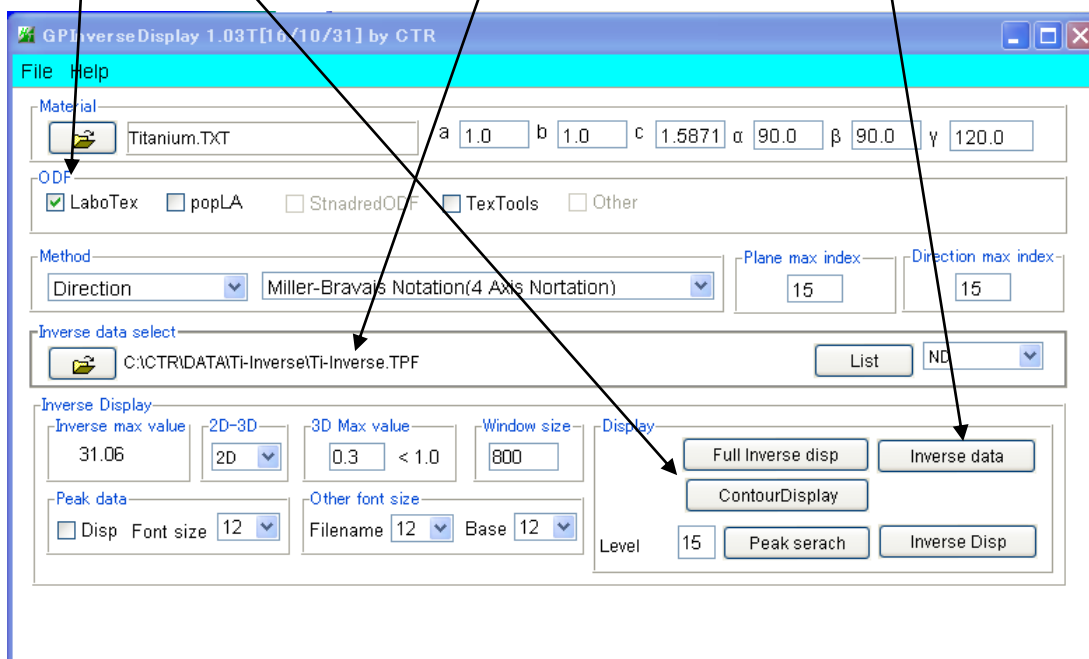
Plane で計算



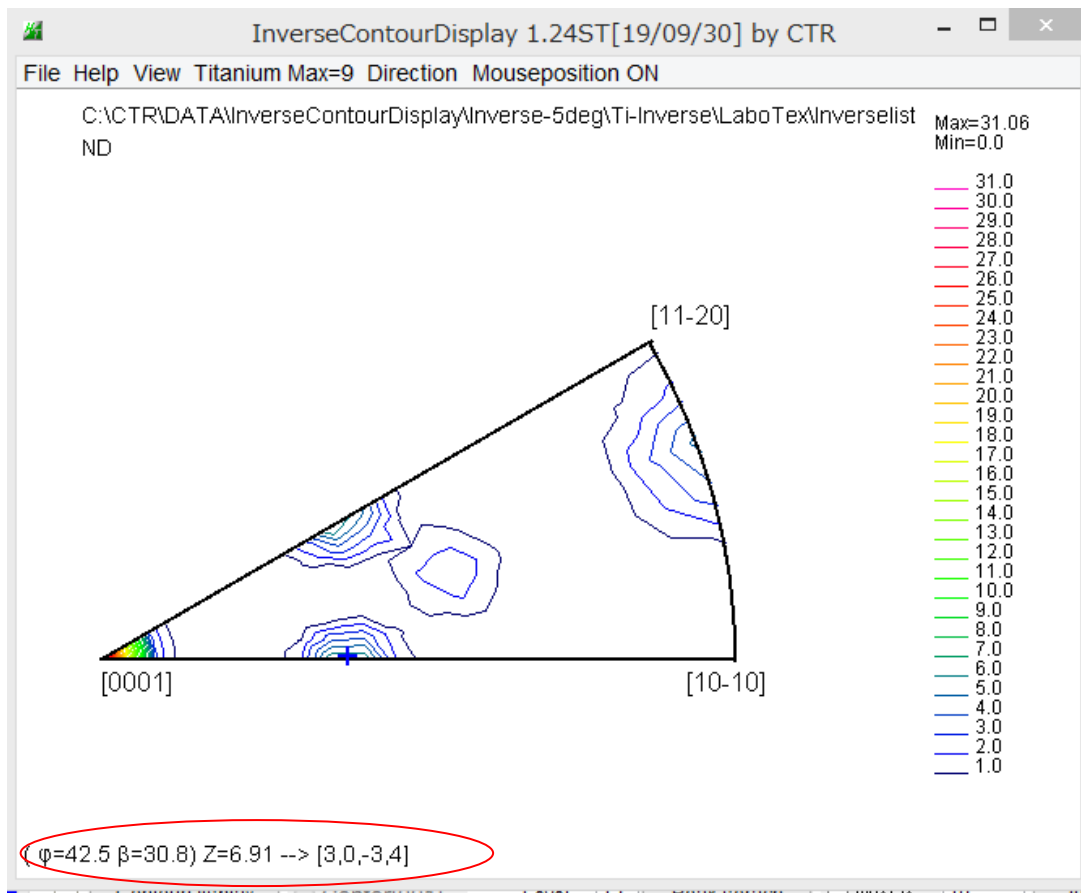
3. Hexagonalの場合

3.1 LaboTex

LaboTex で計算した逆極点 Ti-Inverse.TPF の ND 方向を選択し、InverseData で InverseContourDisplay 向けデータを作成



方位計算する最大指数を6として Direction 計算



Plane で計算

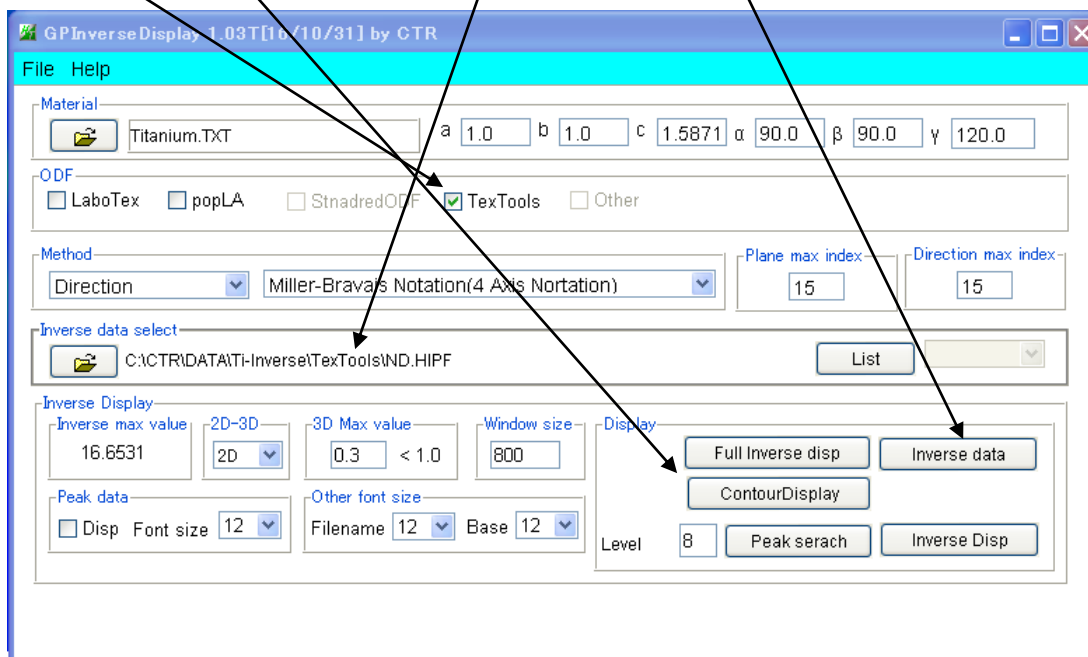
($\phi=42.5$ $\beta=30.8$) $Z=6.91$ --> (1,0,-1,2)

Direction は[hkl]、Plane は(hkl)で表示

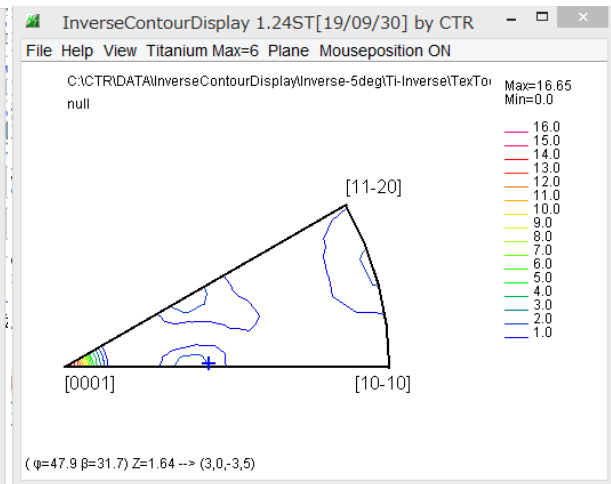
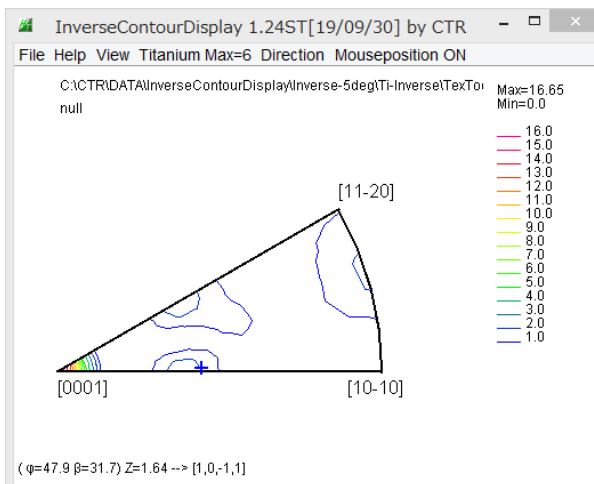
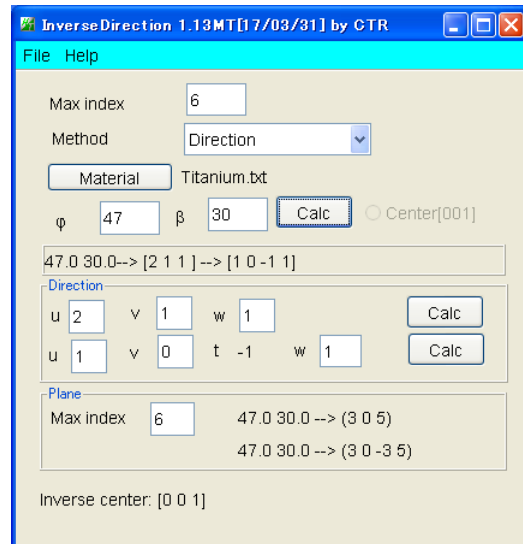
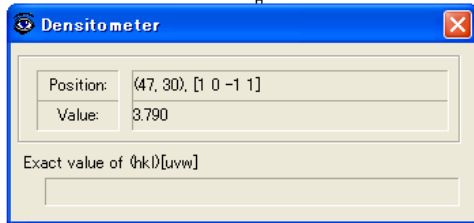
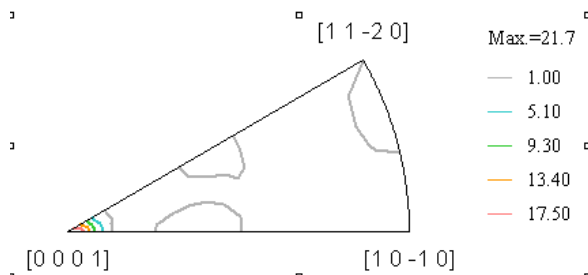
Hexagonal の場合、[0001]-[10-10]の β 角度は 30 度です。

3. 2 TextTools

TextTools で計算した逆極点 ND.HIPF を選択し、InverseData で InverseContourDisplay 向けデータを作成

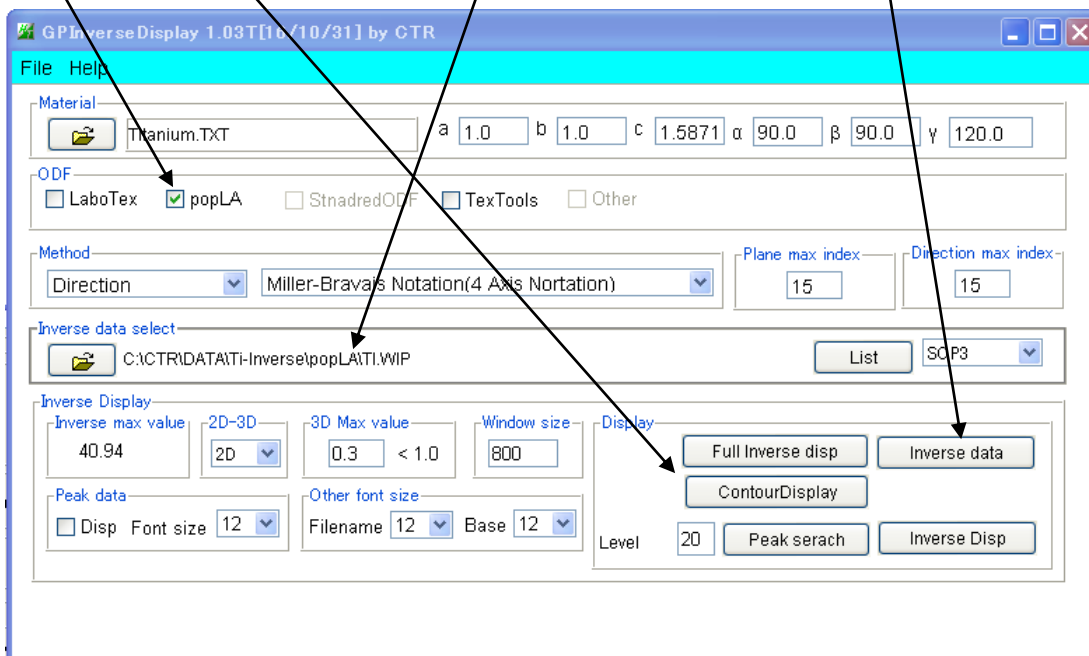


方位計算する最大指数を 6 として Direction 計算

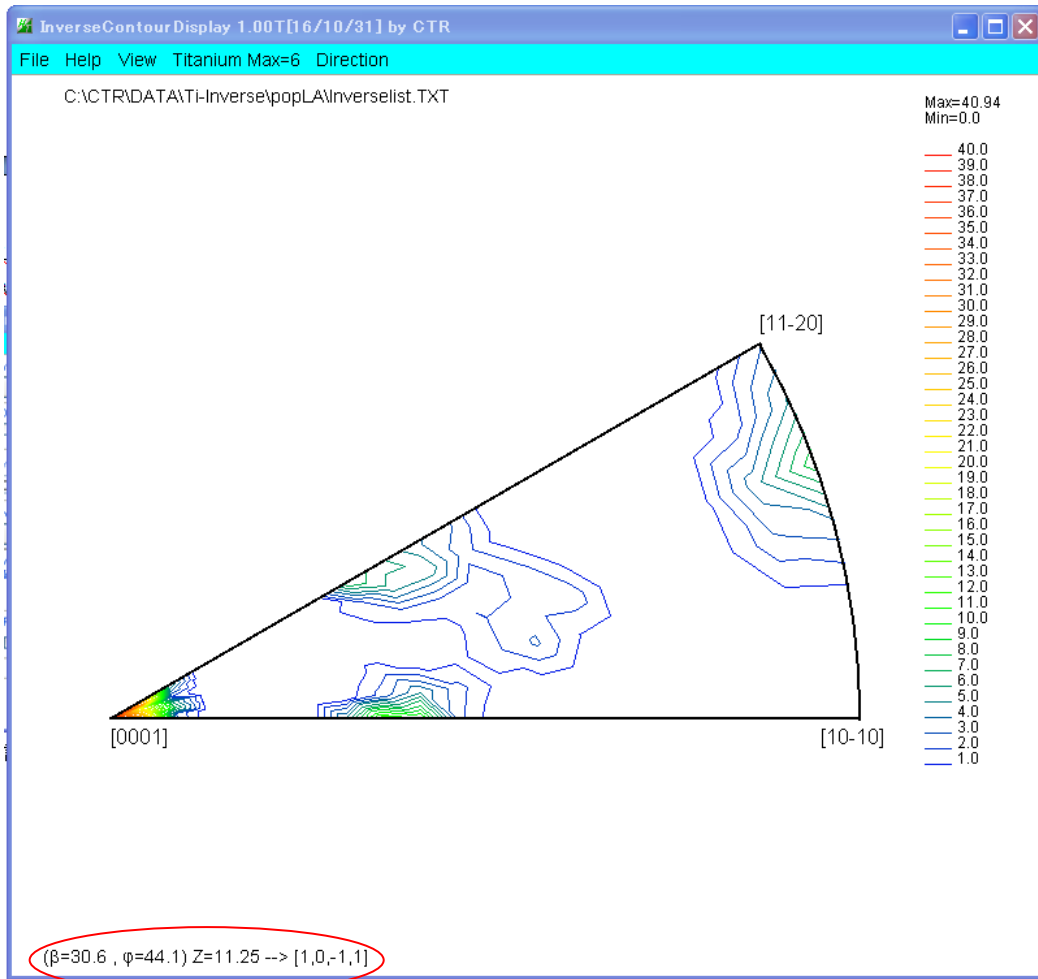


3. 3 popLA (WIMV)

popLA で計算した逆極点 Ti.WiP の ND 方向を選択し、InverseData で InverseContourDisplay 向けデータを作成



方位計算する最大指数を6として Direction 計算



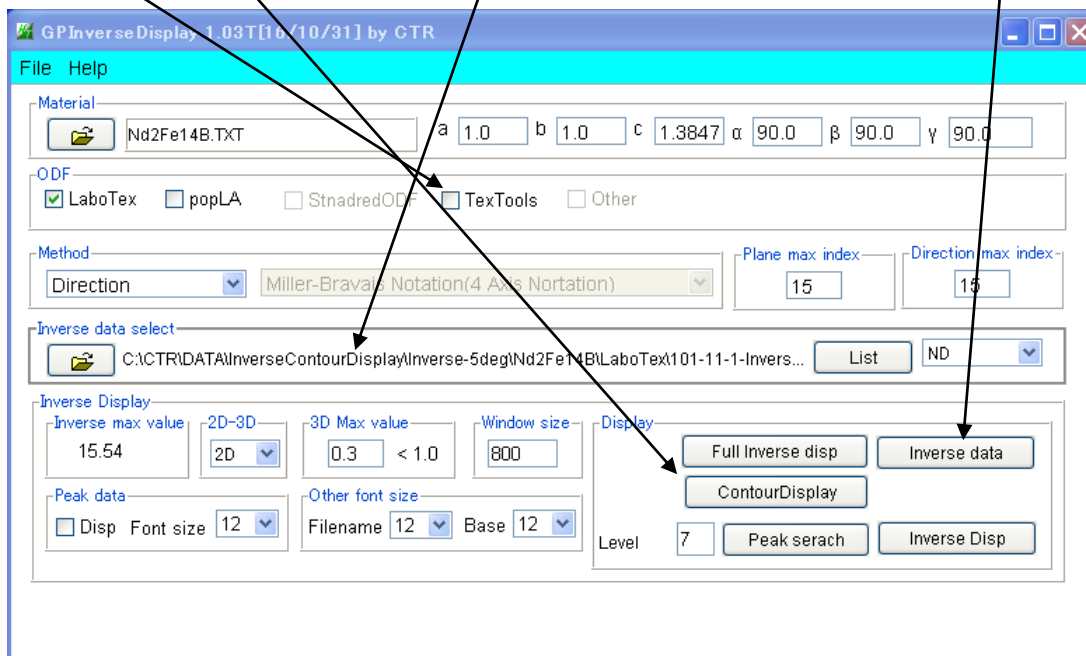
Plane 計算

$$(\beta=30.4, \phi=44.0) Z=11.25 \rightarrow (1,0,-1,2)$$

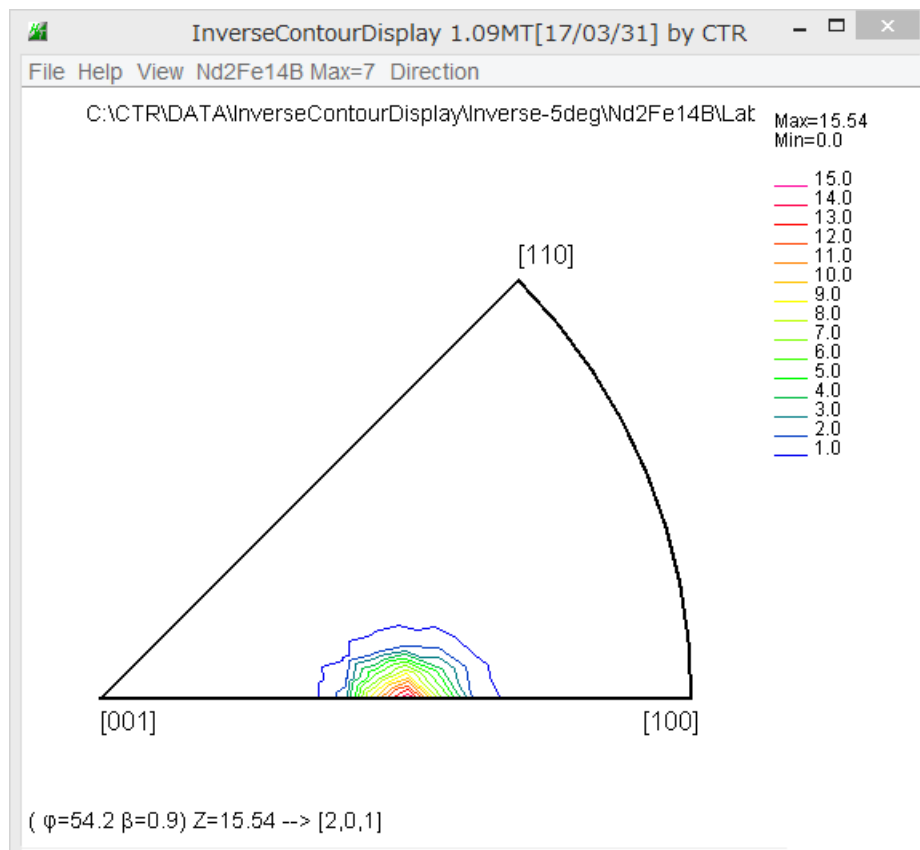
4. Tetragonal

4.1 Labotex

LaboTex で計算した逆極点 101-11-1-Inverse.TPF の ND 方向を選択し、InverseData で InverseContourDisplay 向けデータを作成



方位計算する最大指数を9として Direction 計算

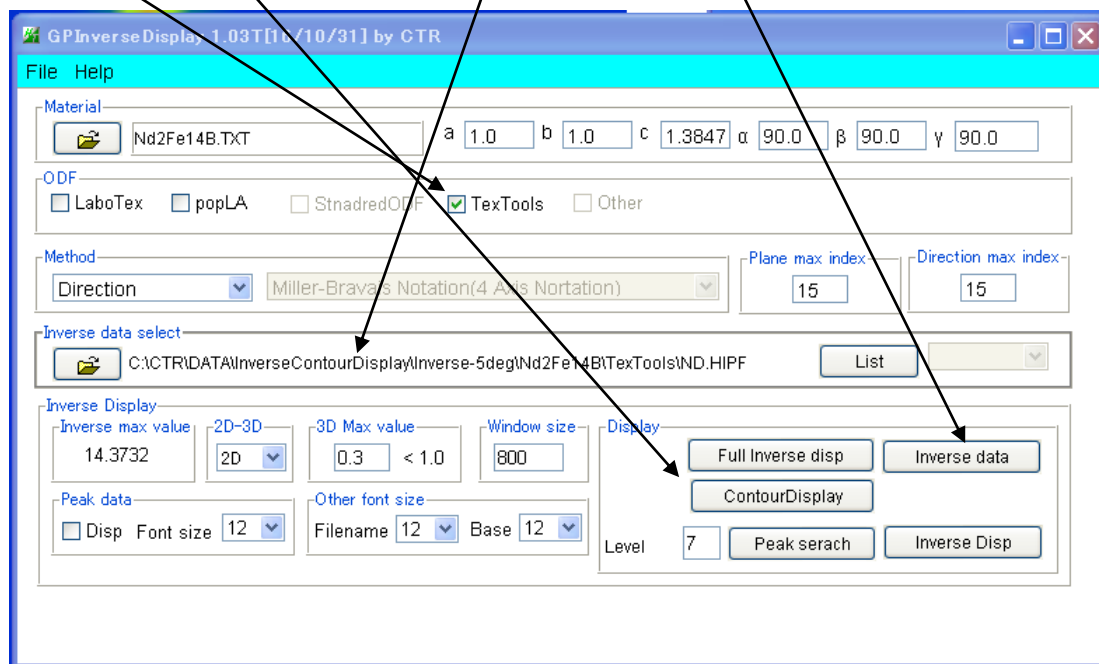


Plane では

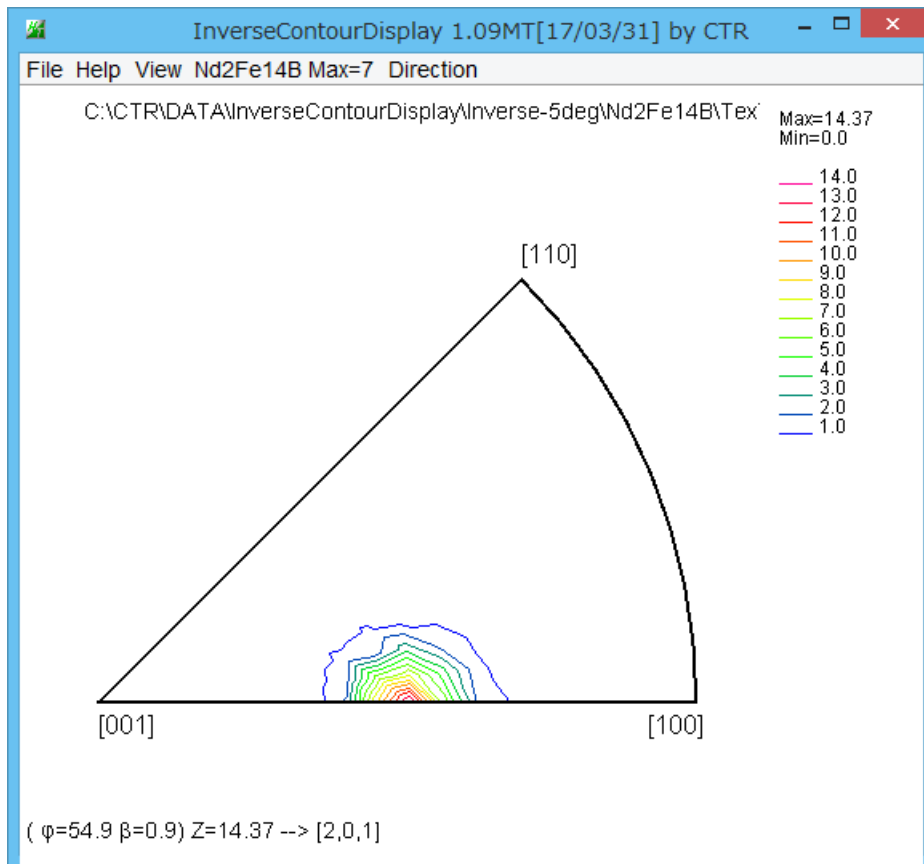
($\beta=0.6$, $\phi=54.9$) $Z=14.37$ --> (1,0,1)

4. 2 TextTools

TexTools で計算した逆極点 ND.HIPF を選択し、InverseData で InverseContourDisplay 向けデータを作成



方位計算する最大指数を9として Direction 計算



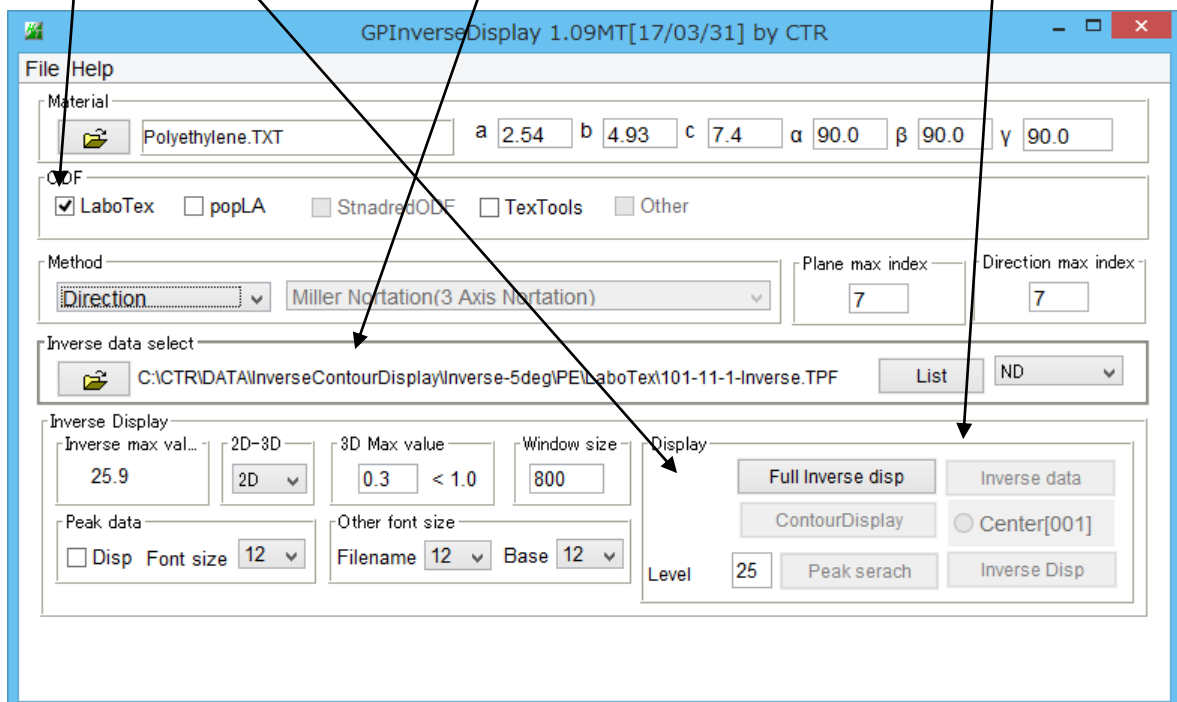
Plane では

($\beta=1.0$, $\phi=54.9$) $Z=14.37 \rightarrow (1,0,1)$

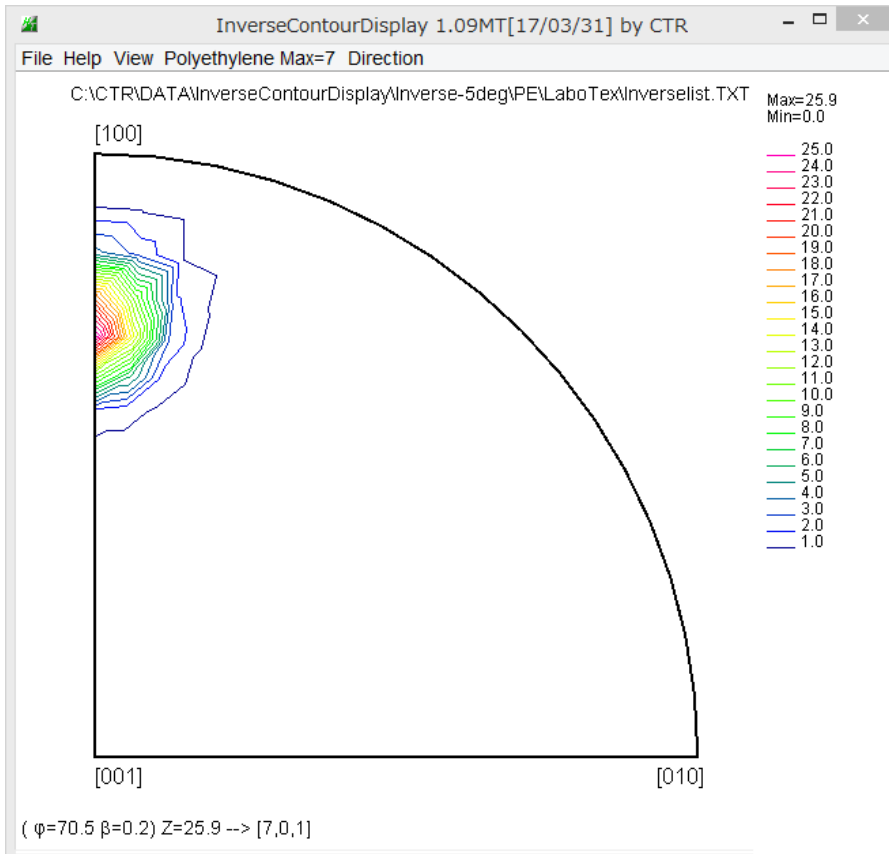
5. Orthorombic

5.1 Labotex

Labotex で計算した逆極点 101-11-1-Inverse.TPF の ND 方向を選択し、InverseData で InverseContourDisplay 向けデータを作成



方位計算する最大指数を9として Direction 計算

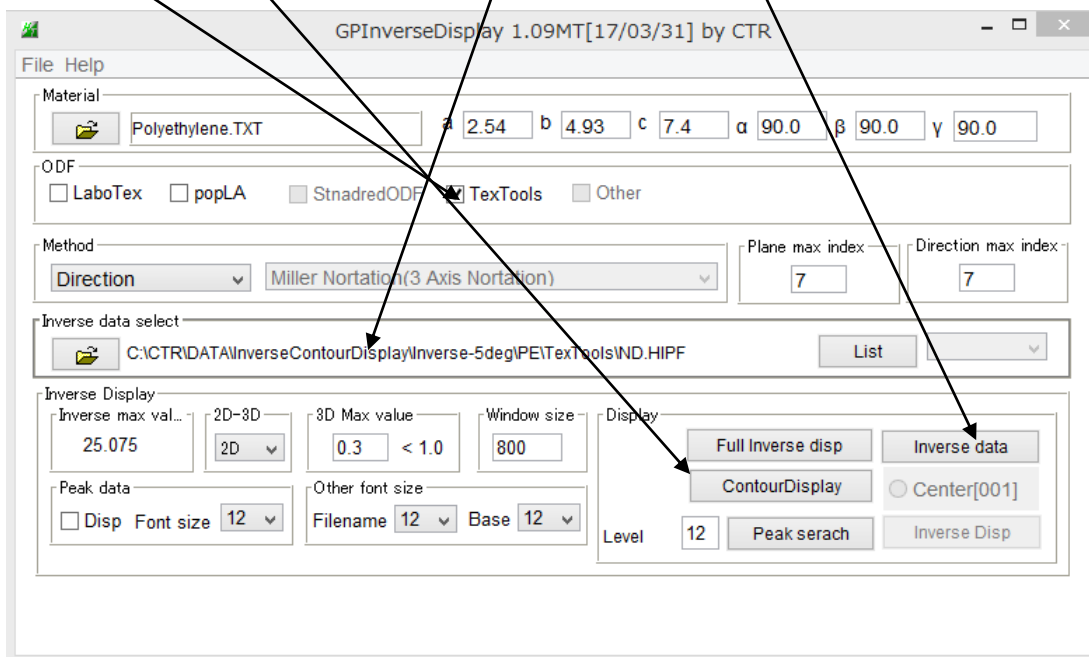


Plane では

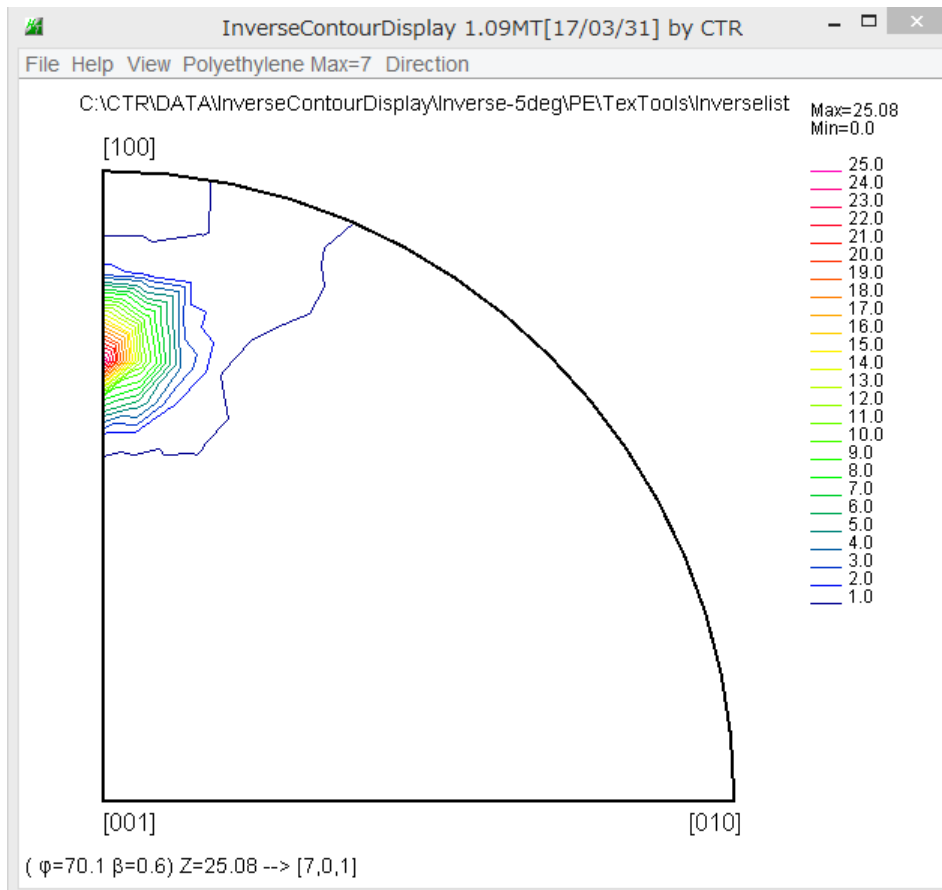
($\phi=70.5$ $\beta=0.2$) $Z=25.9$ --> (1,0,1)

5. 2 TexTools

TexTools で計算した逆極点 ND.HIPF を選択し、InverseData で InverseContourDisplay 向けデータを作成 (ミラー指数を LaboTex モードで解析が行われている)



方位計算する最大指数を 9 として Direction 計算



Plane では ($\phi=70.6 \beta=0.2$) $Z=25.08 \rightarrow (1,0,1)$

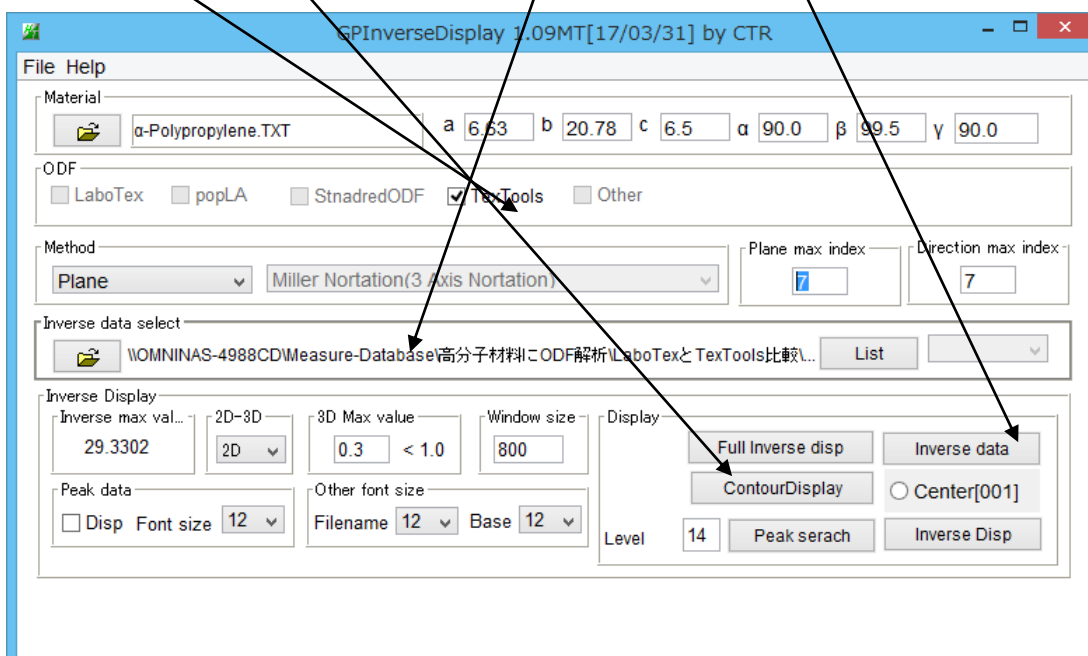
Orthorombic 材料を TexTools で解析する場合、格子定数やミラー指数を ICDD か LaboTex なのか解析を行った、TexTools の入力ファイルミラー指数で判断してください。

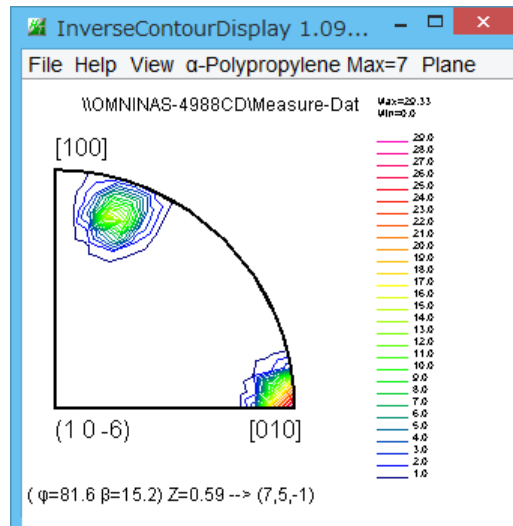
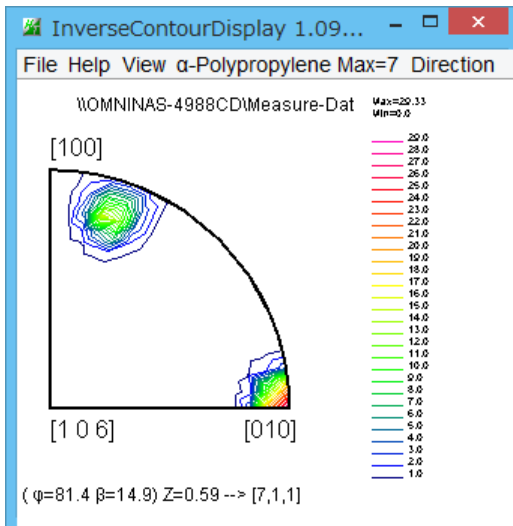
間違うと、Direction と Plane が逆転します。

6. Monoclinic の場合

6.1 TexTools

TexTools で計算した逆極点 ND.HIPF を選択し、InverseData で InverseContourDisplay 向けデータを作成





[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

{0 1 0} 90.0 90.0 29.33 90.0 0.0
 {7 5 -1} 81.377 15.0 15.583 81.377 75.0

中心座標は計算するミラー指数の最大値に左右されます。

7. 複数角度入力サポート (CubicはInverseCubicContourDisplay)

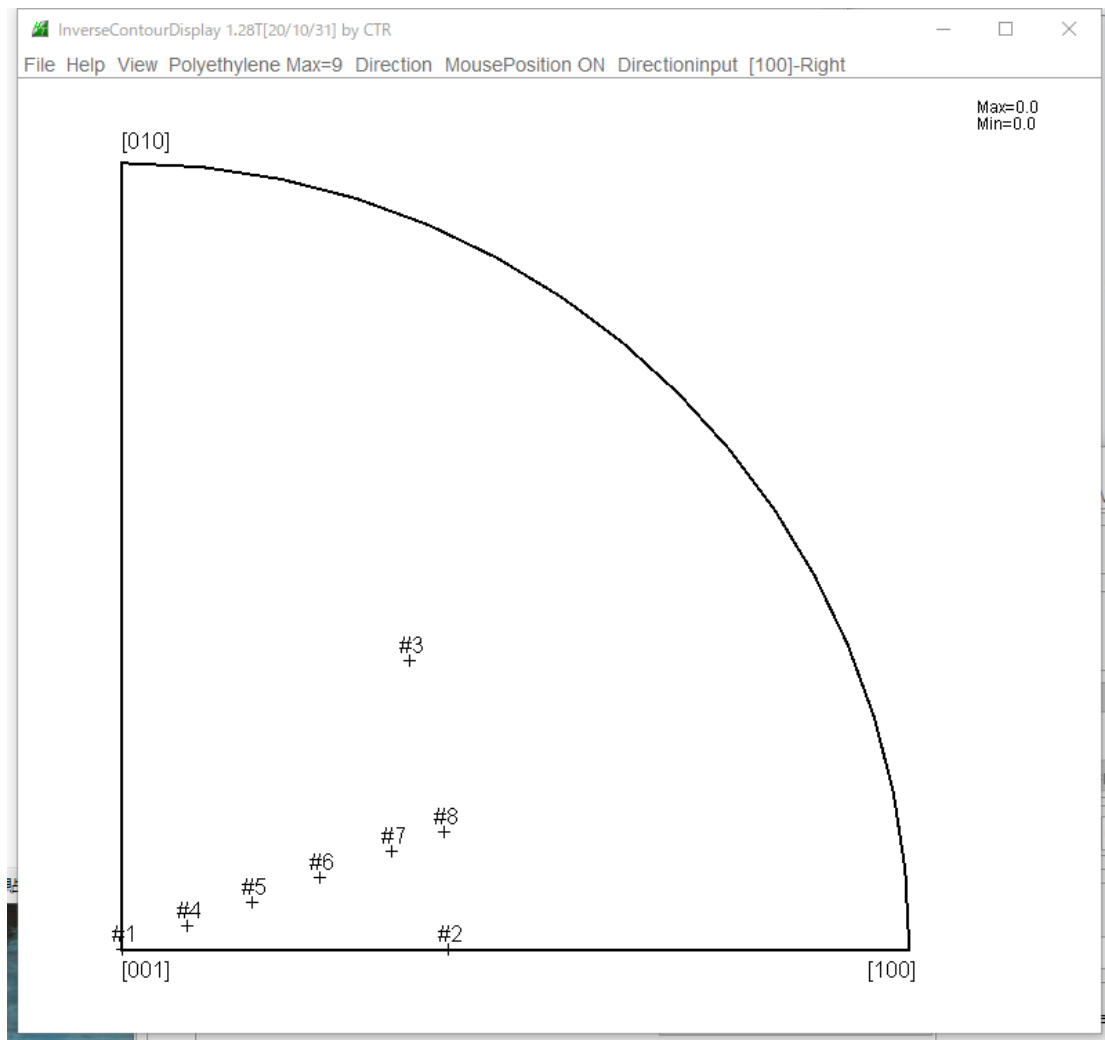
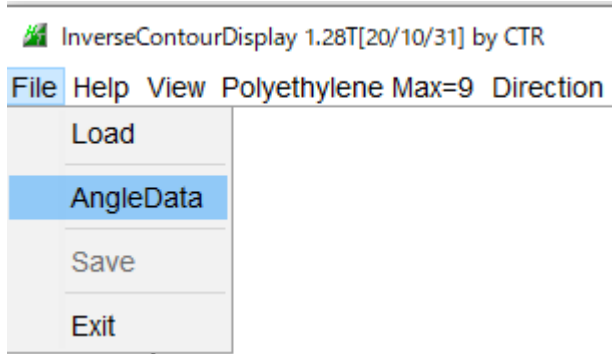
7.1 Orthorhombic

予め、Excelで角度データを作成、区切り文字はTab

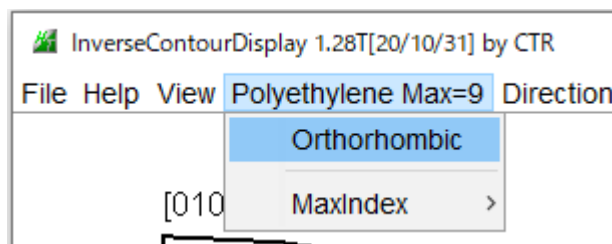
fai	beta	String↓
0	0	#1↓
45	0	#2↓
54.7	45	#3↓
10	20	#4↓
20	20	#5↓
30	20	#6↓
40	20	#7↓
47	20	#8↓

(Cubic データを使用)

角度データ読み込み



7. 2 Hexagonal

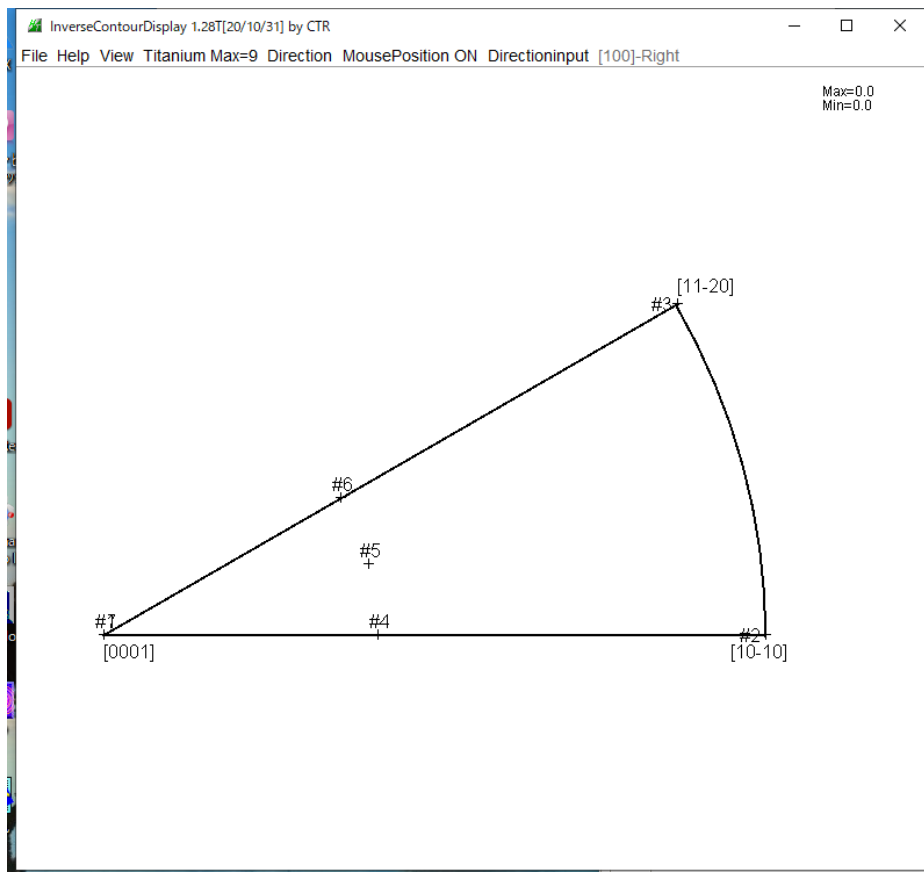
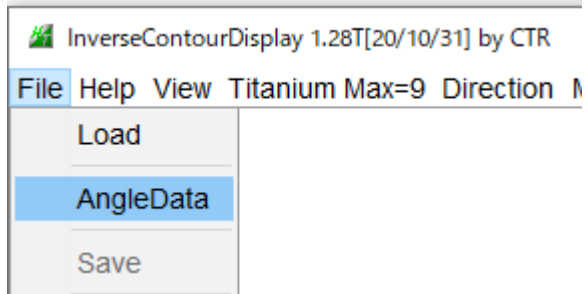


Hexagonalを選択

データ作成

fai	beta	String↓
0	0	#1↓
90	0	#2↓
90	30	#3↓
45	0	#4↓
45	15	#5↓
45	30	#6↓
0	0	#7↓

データ読み込み



8. B C C S c h m i d 因子表示時、回転角度と指数を表示

