Tetragonal, Orthorhombic, Heagonalのための逆極点表示 InverseContourDisplayソフトウエア Ver1.37A

Tetragonal,Orthorombuc,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 ソフトウエアでも確認出来ます。

GPInverseDisplay、InverseCubicDisplay、InverseDirection ソフトウエアで 強力な逆極点解析ツールが揃いました。

¼ InverseDirection 1.15ST[19/09/30] b 😑 🗖 🗙				
File Help				
Max index 15 Method Direction ~				
Material Titanium.txt				
φ 47.5 β 60.0 Calc Ocenter[001]				
Hexagonal: Input βangle 30->60				
47.5 60.0> [3 3 2]> [1 1 -2 2]				
Direction				
u 3 V 3 w 2 Calc				
u 1 v 1 t -2 w 2 Calc				
Plane				
Max index 15 47.5 60.0> (1 1 3)				
47.5 60.0> (1 1 -2 3)				
Exit return Structure				

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 で密度が追随していない 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ソフトウエアの使い方
 - 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. 複数角度入力のサポート(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、同一ソフトウエアでは実現しにくい為、Cubic以外を本ソフトウエ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	$(0, 0) \rightarrow (90, 90)$
Hexagonal	$(30, 0) \rightarrow (60, 90)$

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解析をを行い GPInverseDisplayソフトウエアで本ホフトウエ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:StandradODFはCubicのみ

材料選択に、MaterialData ソフトウエアか、MaterialDataManual ソフトウエアが必要

2. InverseContourDisplayの使い方

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

ODFPOleFigure 2 - StoolKit - Inverse Tools - Inverse Countour Display

M ODFPoleFigure2 3.46	YT[16/10/31] by CTR	
File Linear(absolute)3D	ToolKit Help InitSet BGMo	de Measu
Files select ASC(RINT-PC)	PFtoODF3	
	SoftWare	
Calcration Condition Previous Next	ImageTools	
	PopLATools	
Backgroud delete mode	ODFAfterTools) Nothing
р. н. н. 70	PoleOrientationTools	PG Soon
Peak slit	DataBaseTools	
AbsCalc Schulz reflection meth	o FiberTools	en 133.(
Defocus file Select	StandardODFTools	
O Defocus(1) functio	ns DefocusTools	f¥New-CO≩
Make de	f ClusterTools	~ [
	InverseTools	
O Defocus(3) functio	n MeasureDatatoASCTools	SmartLa
⊙ Defocus(2) functio	n OrientationDisplayTools	SmartLa

🌃 InverseTools 1.09X by CTR					
File Help					
Asc Profile(or Division)	ProfiletoDivisionProfile	DivisionProfile(index) Asc			
Asc- DivisionProfile(Index)	InverseAll	Inverse TXT File			
HKL Intens 2Theta TEXT data	MeasureDatatoMYICDD	MYICDD data			
InverseTXT Inverse Data	InverseDisplay	Inverse 3D Display			
-InverseTXT- Hexalnverse Data	InverseDisplayHexa	Hexalnverse 3D Display			
-Asc Profile	Lotgering Method	Text Data			
Asc(files) Profiles	Lotgering and Inverse	Text Data			
ODF-Inverse	InverseDirection	Direction-Plane Data disp			
ODF-Inverse Inverse Data	GPInverseDisplay	Inverse 3D Display			
Inverselist Inverse Data	InverseCubicContourDisplay	InverseContour Display			
Inverse Data	InverseContourDisplay	InverseContour Display			

データの入力

<u>14</u>			InverseCont	ourDispla	ay 1.24ST[19/09/3	30] by CTR	-	×
File	Help	View	Titanium Max=9	Direction	MousePosition OFF	:		
	Load							
	Save							
	Exit							

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ソフトウエ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



本ソフトウエアは、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ので、最大指数を超える事もあります。



2. 4指数計算のDirection<->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 InverseCountourDisplay 向けデータを作成

GPLiverseDisplay 1.03T[16/10/31] by CTR	
File Help	
Material a 1.0 b 1.0 c 1.5871 α 90.0 β 90.0 ODF V LaboTex popLA StnadredODF TexTools Other	γ 120.0
Method Direction Miller-Bravais Notation(4 Axe Nortation)	Direction max index-
Inverse data select C:\CTR\DATA\Ti-Inverse\Ti-Inverse.TPF List	
Inverse Display Inverse max value 31.06 2D V 2D V 3D Max value 0.3 < 1.0 Bod d bis ContourDisplay ContourDisplay	Inverse data
Image: Disp Font size Image: Disp Font size Image: Disp Font size Filename Image: Disp Font size Image: Disp Font size Im	Inverse Disp
ち位計管 する是十些粉 なら として Dimonian 計管	

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 TexTools

TexTools で計算した逆極点 ND.HIPF を選択し、InverseData で InverseCountourDisplay 向けデータ**才**作成

GPInverseDisplat 1.03T[10/10/31] by CTR	
File Help	
Material Titanium.TXT	b 1.0 c 1.5871 α 90.0 β 90.0 γ 120.0
LaboTex popLA StnadredOF	Is Other
Direction Miller-Brava's Notation(4 Axs	Nortation)
Inverse data select C:\CTR\DATA\Ti-Inverse\TexTools\ND.HIPF	List
Inverse Display Inverse max value 16.6531 Peak data Disp Font size 12 V 12 V 12 V 12 V 12 V 13 Max value 0.3 < 1.0 0.3 < 1.0 10 Mer font size Filename 12 V Base 1	N size Display Full Inverse disp Inverse data ContourDisplay Level B Peak serach Inverse Disp

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 InverseCountourDisplay 向けデータ**社**作成

GPInverseDisplay 1.03T[11] 10/31] by CTR	
File Hel	
Material a 1.0 b 1.0 c 1.5871 α 90.0 β 90.0 ODF LaboTex popLA StnadredOFF TexTools Other	γ 120.0
Method Direction Miller-Bravais Notation(4 Axis Nortation) Plane max index 15 Inverse data select C:CTR\DATA\Ti-Inverse\popLA\TI.WIP List	Direction max index- 15 SCP3
Inverse Display Inverse max value 40.94 Peak data □ Disp Font size 12 ♥ I Disp Font s	Inverse data

方位計算する最大指数を6として Direction 計算





- 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 InverseCountourDisplay 向けデータを作成

GPInverseDispla, 1.03T[16/10/31] by CTR	
File Help	
Material Material Md2Fe14B.TXT α 1.0 b 1.0 c 1.3847 α 90.0 β 90.0 γ 90.0 c 0DF	
LaboTex popLA StnadredOD TexTools Other	
Method Direction Miller-Bravaic Notation(4 As Nortation)	x index-
Inverse data select C:\CTR\DATA\InverseContourDisplay\Inverse-5deg\Nd2FeNB\LaboTex\101-11-1-Invers List ND	*
Inverse Display- Inverse max value 15.54 2D 3D Max value 0.3 4.0 Window size 800 Full Inverse disp Inverse data	3
Peak data Other font size ContourDisplay Disp Font size Filename 12 V Base 12 V Evel	0
]

方位計算する最大指数を9として Direction 計算



Plane では

```
(β=0.6, φ=54.9) Z=14.37 --> (1,0,1)
```

4.2 TexTools

```
TexTools で計算した逆極点 ND.HIPF を選択し、InverseData で
InverseSountourDisplay 向けデータ社作成
```

GPInverseDispla, 1.03T[1 /10/31] by CTR	
File Help	
Material a 1.0 b 1.0 c 1.3847 α 90.0 γ 90.0 ODF]
Method Direction Miller-Bravas Notation(4 As Nortation) Plane max index I5 Direction max in I5 List List	dex-
Inverse Display- Inverse max value 2D-3D 3D Max value Window size 14.3732 2D 0.3 < 1.0]

方位計算する最大指数を9として Direction 計算



```
(β=1.0, φ=54.9) Z=14.37 --> (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 InverseCountourDisplay 向けデータ文作成

26	GPInverseDisplay 1.09MT[17/03/31] by CTR	- 🗆 🗙
File	Help /	
_ Ma		
	Polyethylene.TXT a 2.54 b 4.93 c 7.4 α 90.0 β 90.0	γ 90.0
_ conc	F	
	LaboTex popLA StnadredOLE TexTools Other	
_E Me	thod Plane max index / C)irection max index-
i i	Direction V Miller No tation(3 Axis No tation)	7
		ND M
	C:\CTR\DATA\InverseContourDisplay\Inverse-5deg\PE\DaboTex\101-11-1-inverse.TPF	ND V
[Inv	erse Display	
	nverse max val 2D-3D - 3D Max value - Window size - Visplay	
	25.9 2D V 0.3 < 1.0 800 Full Inverse disp	nverse data
F	Peak data Other font size ContourDisplay O C	enter[001]
[Disp Font size 12 v Filename 12 v Base 12 v Level 25 Peak serach Ir	nverse Disp
	1	

方位計算する最大指数を9として Direction 計算



Plane では

```
( φ=70.5 β=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 InverseSountourDisplay 向けデータ文作成(ミラー指数をLaboTex モードで解析が行われている)

GPInverseDisplay 1.09MT[17/03/31] by CTR -	x
File Help	
Material Polyethylene.TXT Polyethylene.	
ODF DaboTex popLA StnadredODF TexTools Other	
Method Plane max index Direction max index 7	×-
	٦.
Inverse Display	
Inverse Display Inverse Display 25.075 2D 0.3 < 1.0	_
Inverse Display 2D-3D 3D Max value Window size Display Inverse data 0.3 < 1.0	
Inverse Display Other font size Filename 12 v Base 12 v Level 12 Peak serach Inverse Disp	
Inverse Display	
Inverse Display 2D-3D 3D Max value Window size Display Inverse max val 2D-3D 0.3 < 1.0	

方位計算する最大指数を9として Direction 計算



Plane では (φ=70.6 β=0.2) Z=25.08 --> (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

Inverse Sountour Display 向けデータを作成

M CPInverseDisplay 1.09MT[17/03/31] by CTR				
File Help				
Material α-Polypropylene.TXT α 6.63 b 20.78 c 6.5 α 90.0 β 90.5 γ 90.0				
ODF				
LaboTex popLA StnadredODF Tectools Other				
Method Plane max index Qirection max index				
Plane V Miller Nortation(3 Axis Nortation) V 7 7				
Inverse data select				
WOMNINAS-4988CDWeasure-DatabaseV高分子材料にODF解析UpboTexとTexTools比較L List				
Inverse Display				
29.3302 2D 0.3 < 1.0				
Peak data Other font size Other font size Other font size				
Disp Font size 12 v Filename 12 v Base 12 v Level 14 Peak serach Inverse Disp				



[010]90.0 90.0 29.33 90.0 0.0 {010}90.0 90.0 29.33 90.0 0.0 [711]81.377 15.0 15.583 81.377 75.0 {75-1}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. 複数角度入力のサポート(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

beta	String↓	
0	#1↓	
0	#2↓	
45	#3↓	
20	#4↓	
20	#5↓	
20	#6↓	
20	#7↓	
20	#8↓	(Cubic データを使用)
	beta 0 45 20 20 20 20 20	beta String↓ 0 #1↓ 0 #2↓ 45 #3↓ 20 #4↓ 20 #5↓ 20 #6↓ 20 #7↓ 20 #8↓

角度データ読み込み



7.2 Hexagonal



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↓
1		

データ読み込み

InverseContourDisplay 1.28T[20/10/31] by CTR					
File	Help View	Titanium Max=9 Direction			
	Load				
	AngleData				
	Save				



