

N T E X ソフトウェア

Ver1.00

2024年02月06日

HelperTex Office

1. 概要

単結晶の方位解析としてラウエカメラデータや極点測定データから方位解析を行う

C r y s t a l O r i e n t a t i o n D ソフトウェアを作成し、解析結果からODF図、極点図、逆極点図をn e w C u b i c C O D i s p ソフトウェアでサポートした。

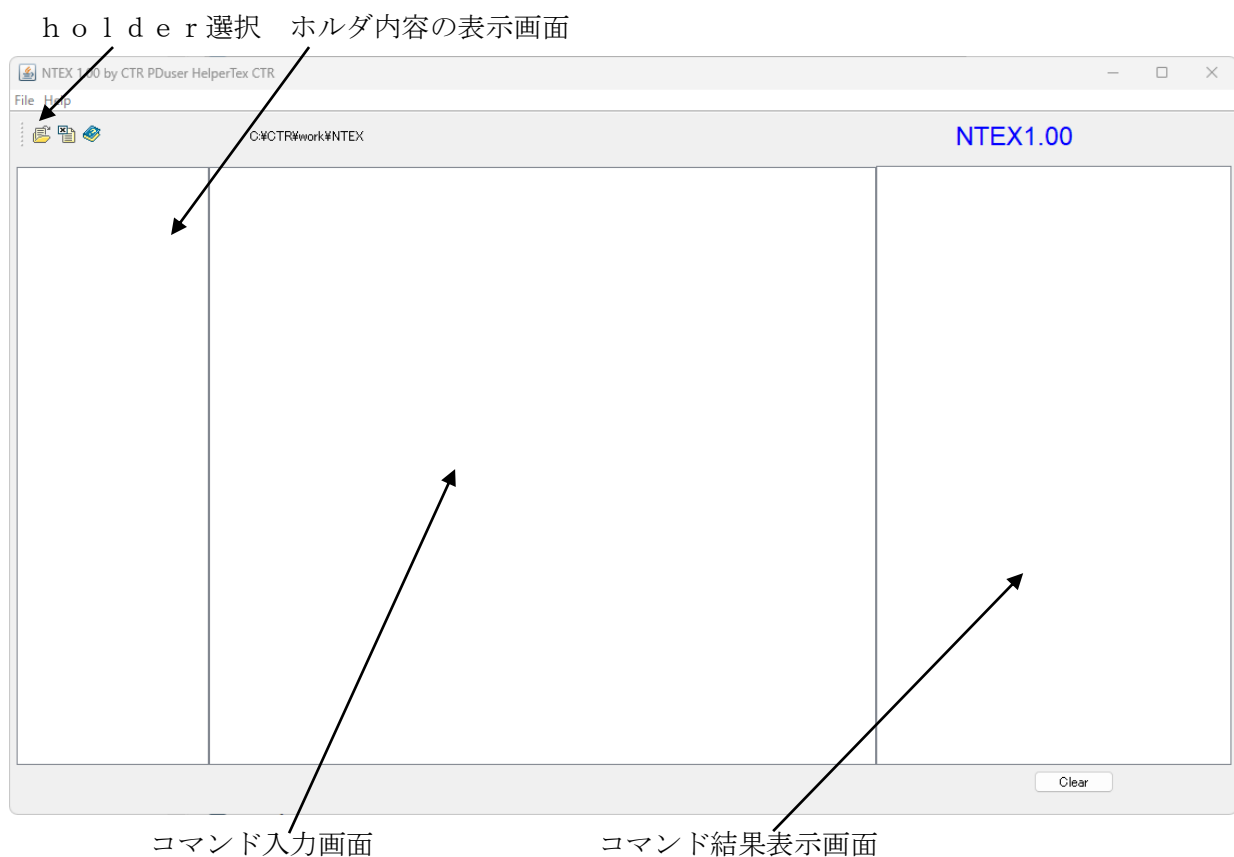
これらのソフトウェアでは、単結晶データの解析を行い、G o s s , c o p p e r , S にて4 : 2 : 1 の比率を確認した。この時点で複数の方位が含まれたODF図や極点図がどのように表示されるか？

M T E X , L a b o T e x でシュミレーションが可能であるが、C T R ソフトウェアで実現する事を考えてみました。

単結晶極点図1面、あるいはラウエ解析結果から、取り付け方位より (h k l) [u v w] が決定される (h k l) [u v w] から、ODF図、極点図、逆極点図描画が可能

複数 (h k l) [u v w] のV F % によりODF図、極点図、逆極点図の描画が可能

拡張性を考え、M T E X に操作性を採用し以下の画面を作成しました。



コマンド画面上にマウスを移動し、クリック、keyをr e t u r n で
入力可能な>が表示される。



> h e l p で V e d r 1 . 0 0 でサポートされているコマンドが表示される

2. コマンド表示

```
*FWHM
setFWHM(fwhm)
```

```
*Symmetry
setSymmetry(Free)
setSymmetry(Orthorhombic)
setSymmetry(Triclinic)
```

```
*rotate
ori=rotate(ORI:ND,10)
ori=rotate(ORI:RD,10.0,TD,10.0,ND,10.0)
pf1=rotate(PF:ND,10.0)
pf1=rotate(PF:RD,10.0,TD,10.0,ND,10.0)
```

方位や極点図の回転

```
*simulation      (FWHM,fwhm)
importTXT2
importTXT2(OFF)
ori=setOrientation([h k l],[u v w])
ori:?
setCube
setCopper
setBrass
setGoss
setS
setR
plot(ori:ODF)
plot(ori:[h k l])
plot(ori:[h k l],fwhm)
plot(ori:[h k l]ORTHO)
plot(ori:[h k l]ORTHO,fwhm)
plot(ori:ND)
```

(h k l) [u v w] 入力による ODF 図、極点図、逆極点図描画

```
*singlecrystal   (FWHM,fwhm)
importsingleTXT2
index(SPF:)
index(SPF:Maxindex)
plot(ORI:ODF)
plot(ORI:[h k l])
plot(ORI:[h k l],fwhm)
plot(ORI:[h k l]ORTHO)
plot(ORI:[h k l]ORTHO,fwhm)
plot(ORI:ND)
```

単結晶極点図による ODF 図、極点図、逆極点図描画

```
*stereographic
setPF
plotStereo(ORI:pf1:pf2:pf3:)
plotStereo(ORI:ALL)
```

方位 (h k l) [u v w] からステレオ投影図描画

```
*calcPoleFigure   (FWHM,fwhm)
rpf=calcPoleFigure(ori:[h k l],[h k l],[h k l])
rpf=calcPoleFigure(ori:[h k l],[h k l],[h k l],fwhm)
rpf=calcPoleFigure(ori:[h k l],[h k l],[h k l]ORTHO,fwhm)
```

方位 (h k l) [u v w] から極点図ファイル作成

```

*multiplot (FWHM)
multiplot(ori1:ori2:ori3:ori4:ODF)
multiplot(ori1:ori2:ori3:ori4:ODF,0.25,0.25,0.25,0.25)
multiplot(ori1:ori2:ori3:ori4:[1 1 1])|
multiplot(ori1:ori2:ori3:ori4:[1 1 1]ORTHO)
multiplot(ori1:ori2:ori3:ori4:[1 1 1],0.25,0.25,0.25,0.25)
multiplot(ori1:ori2:ori3:ori4:[1 1 1]ORTHO,0.25,0.25,0.25,0.25)
multiplot(ori1:ori2:ori3:ori4:ND)
multiplot(ori1:ori2:ori3:ori4:ND,0.25,0.25,0.25,0.25)

```

複数の (h k l) [u v w] による ODF 図、極点図、逆極点図描画

```

*polycrystalline substance
importTXT2
calcODF(PF:)
plot(CTRODF:ODF)
plot(CTRODF:RPF)
plot(CTRODF:ND)

```

多結晶極点図による ODF 図、極点図、逆極点図描画

```

*schmidFactor
setDirection(A ro P or M)
setFCC
setBCC(1:2:3:)
calc(FCC:[h k l])
calc(BCC:[h k l])
disp(FCC:)
disp(BCC:)

```

FCC, BCC schmid 因子計算

3. *WHM 極点図、逆極点図の半価幅指定 FWHM=2.0がデフォルト

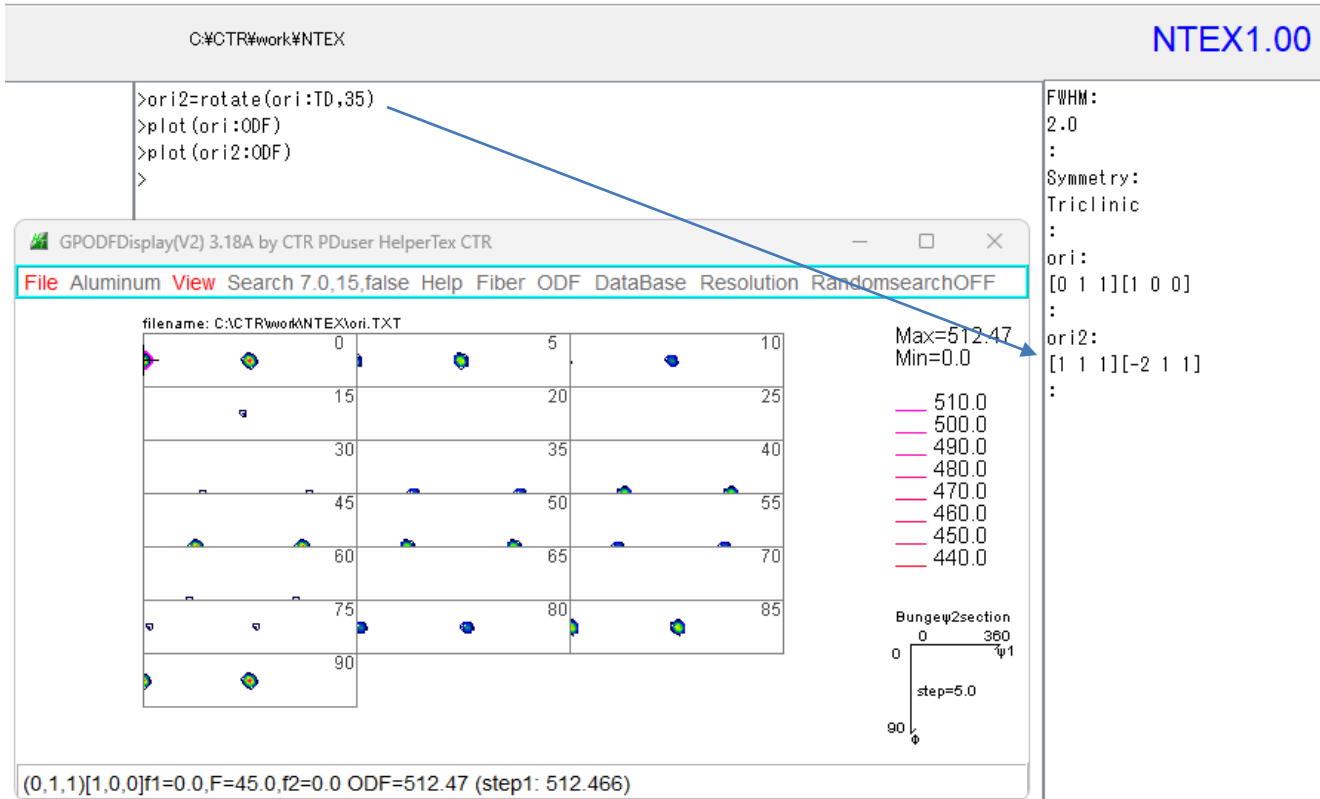
対称性 (Free-Triclinic->Orthorhombic) 切り替え

FWHM: calcPoleFigure、plot、multiplotに対応

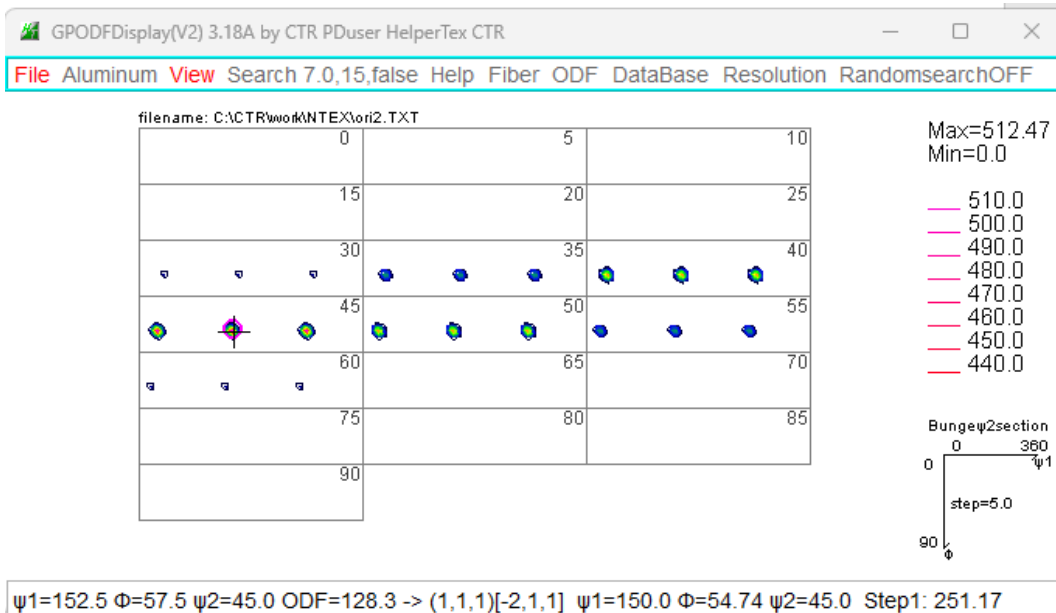
multiplot以外はコマンド内でも変更可能

4. *方位の回転

(011) [100] をTD (35度) 回転で (111) [-211] を得る (Triclinicにて)
(011) [100] ODF図



(111) [-211] ODF図



5. * s i m u l a t i o n

i m p o r t T X T 2 では s t e p = 1 d e g → 5 d e g 自動変換

i m p o r t T X T 2 (O F F) では、無変換

方位指定によるODF図、極点図、逆極点図作成

|>ori1=setOrientation([1 1 2][-1 -1 1]) 入力で

NTEX1.00

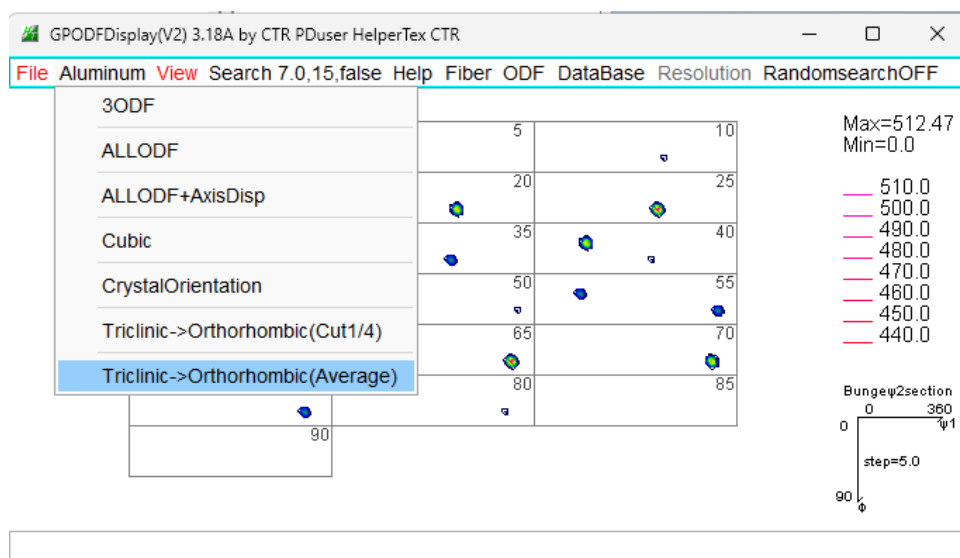
```
ori1:
[1 1 2][-1 -1 1]
:
```

が表示されます。

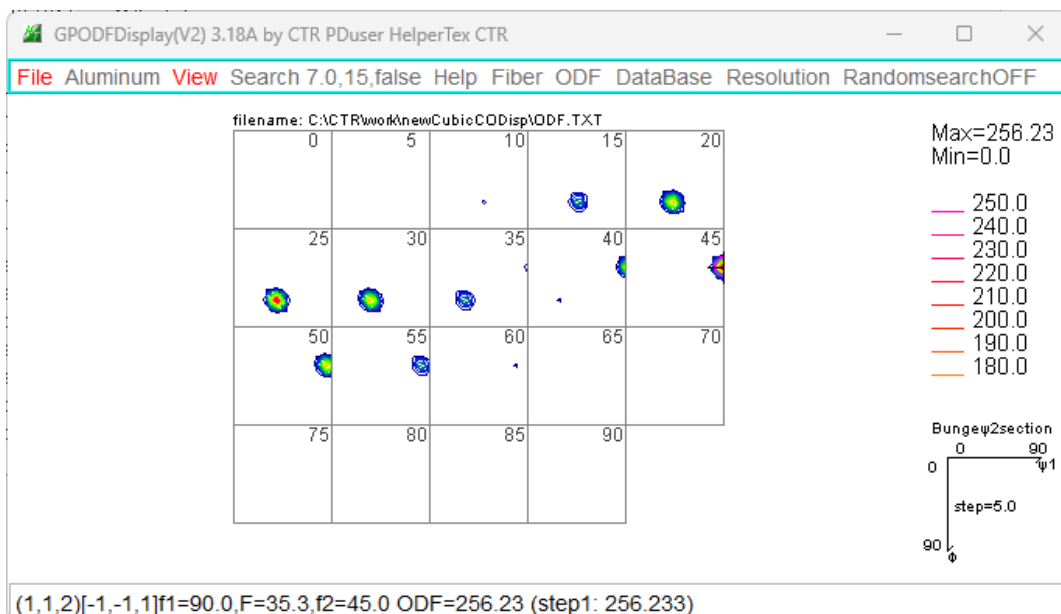
o r i 1 : として方位(1 1 2)[-1 -1 1]が ‘ : ’ に囲まれて登録されます。

ODF図

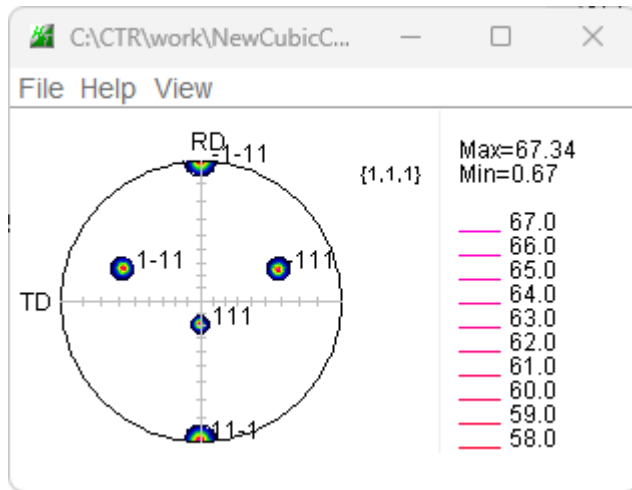
|>plot(ori1:ODF) o r i 1 : から (112)[-1-11]を得て、ODFの計算が行われる



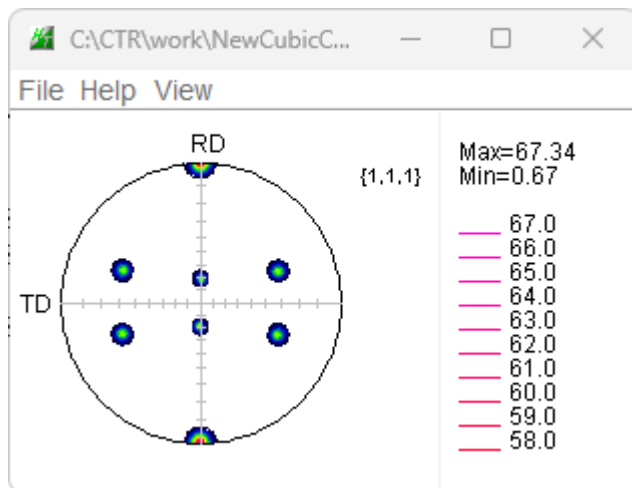
T r i c l i n i c → O r t h o r h o m b i c



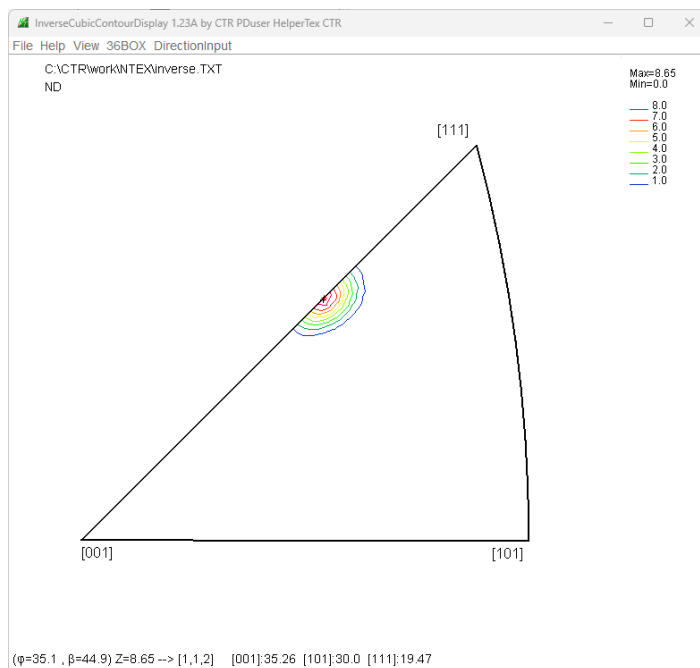
`>plot(ori1:[1 1 1])` `ori1` : により (112)[-1-11] から $\{1\ 1\ 1\}$ 極点図が計算される



`>plot(ori1:[1 1 1]ORTHO)` 上記極点図の 1 / 4 対称極点図が計算される



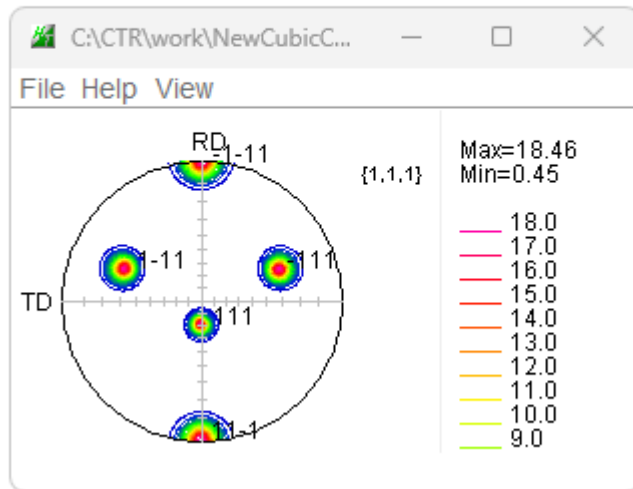
`>plot(ori1:ND)` (112)[-1-11] から、ND 方向逆極点図が計算される



同様に `plot(ori1:RD)`, `plot(ori1:TD)`

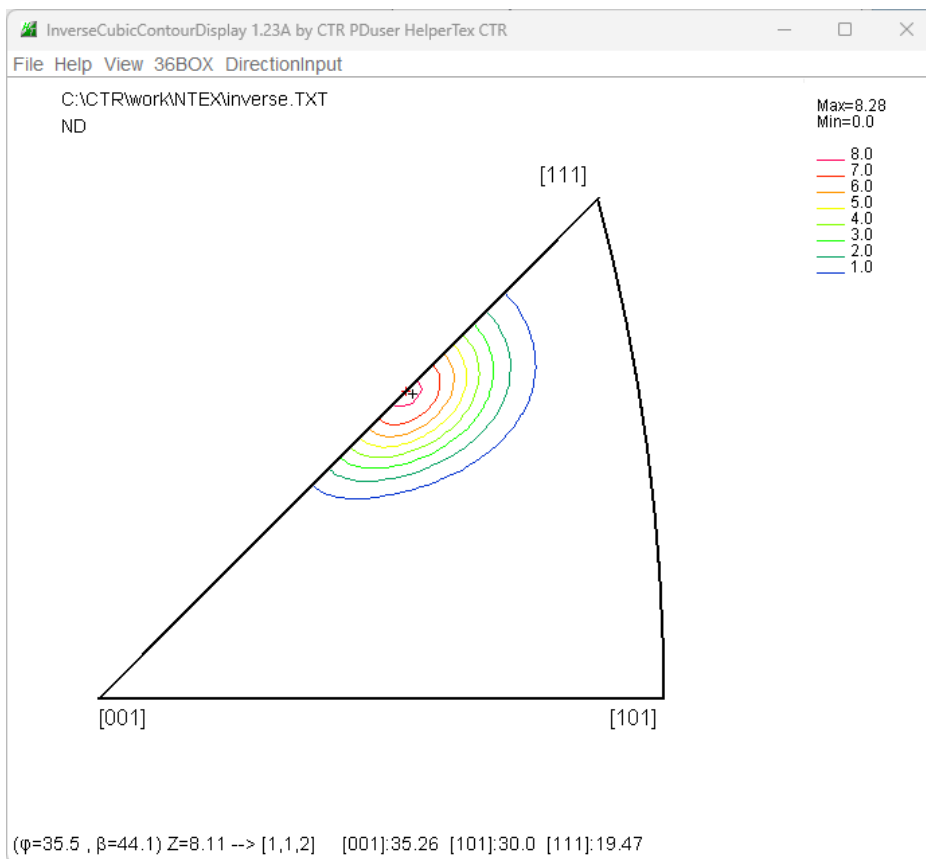
setFWHM (5.0) の確認

```
>ori1=setOrientation([1 1 2][-1 -1 1])
>setFWHM(5.0)
>plot(ori1:[1 1 1])
>
```



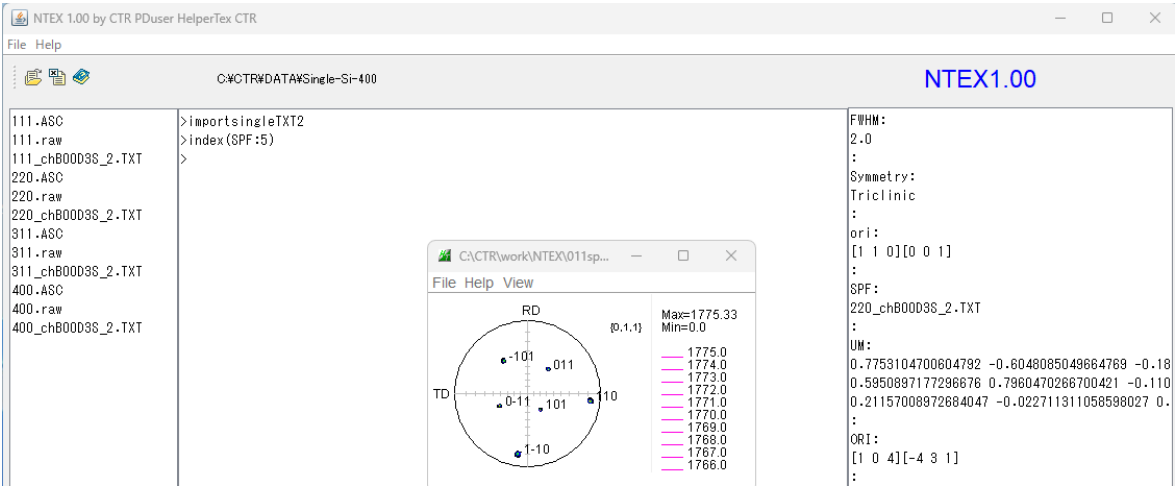
```
>ori1=setOrientation([1 1 2][-1 -1 1])
>setFWHM(5.0)
>plot(ori1:ND)
>
```

```
ori1:
[1 1 2][-1 -1 1]
:
FWHM:
5.0
:
```

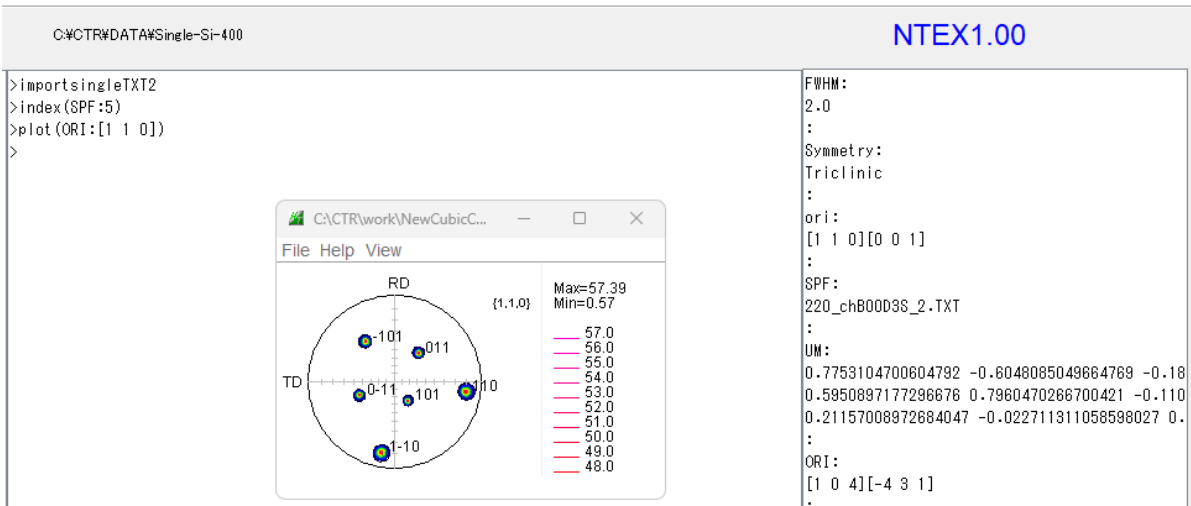


6. *singleCrystal

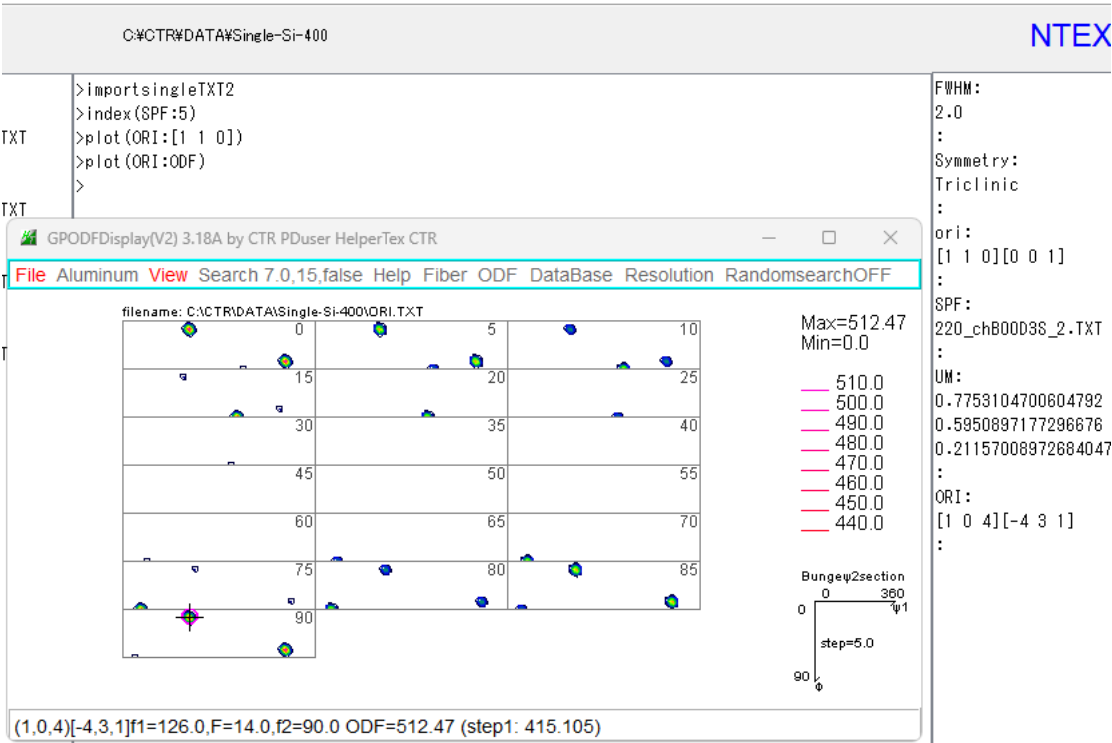
単結晶極点図から方位解析 (1 1 0) 極点図から方位計算



方位 (1 0 4) [-4 3 1] から再計算極点図描画



ODF 図描画

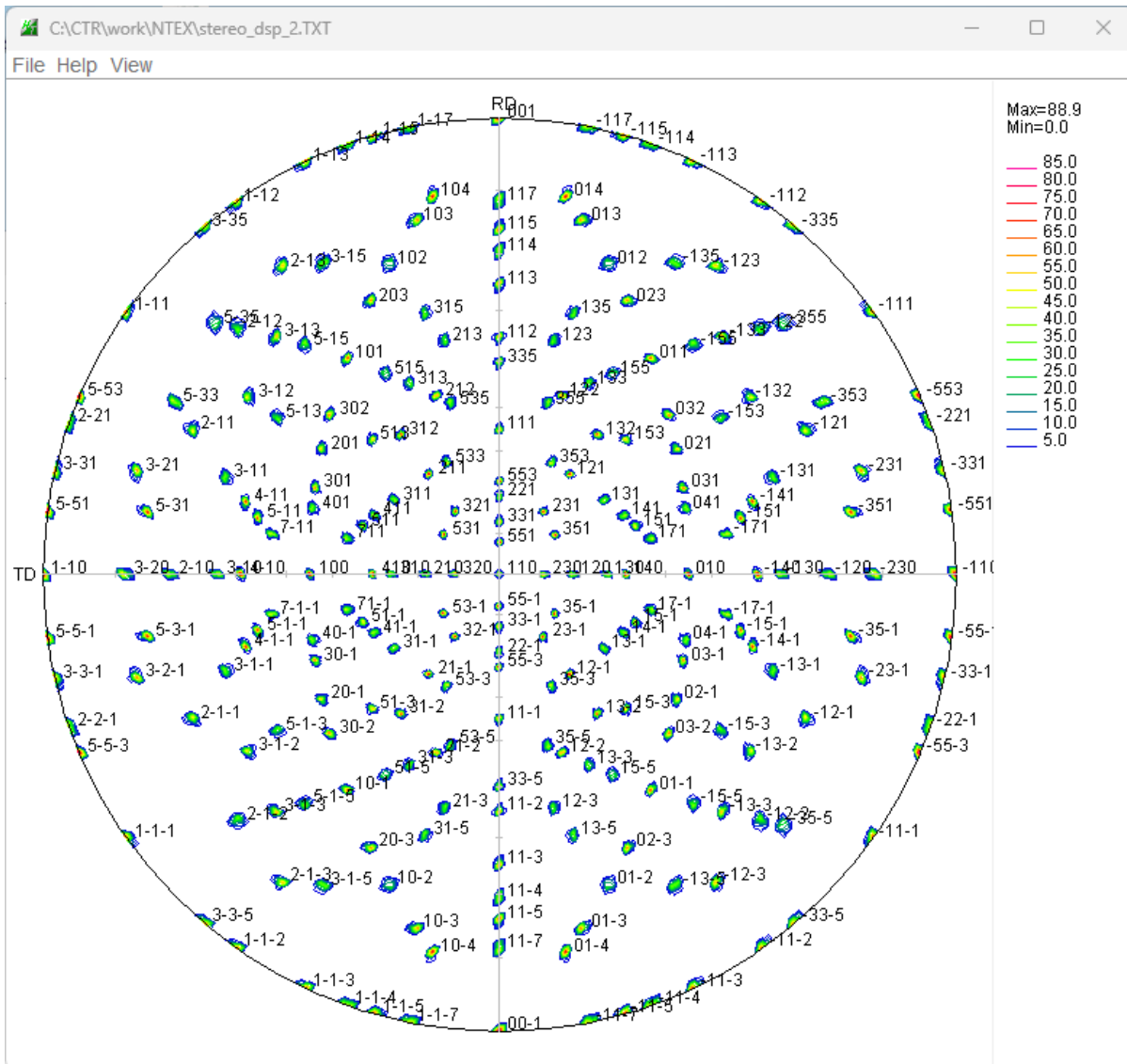


7. *stereographic

(110) [001] のステレオ投影図

通常極点図は、特性X線で測定されるが、ラウエカメラのように連続X線で測定するとステレオ投影図のラウエ斑点が測定される。

```
>setPF
>plotStereo(ori:ALL)
>
```



*calcPoleFigure

結晶方位から極点図ファイル作成

Triclinic 極点図

```

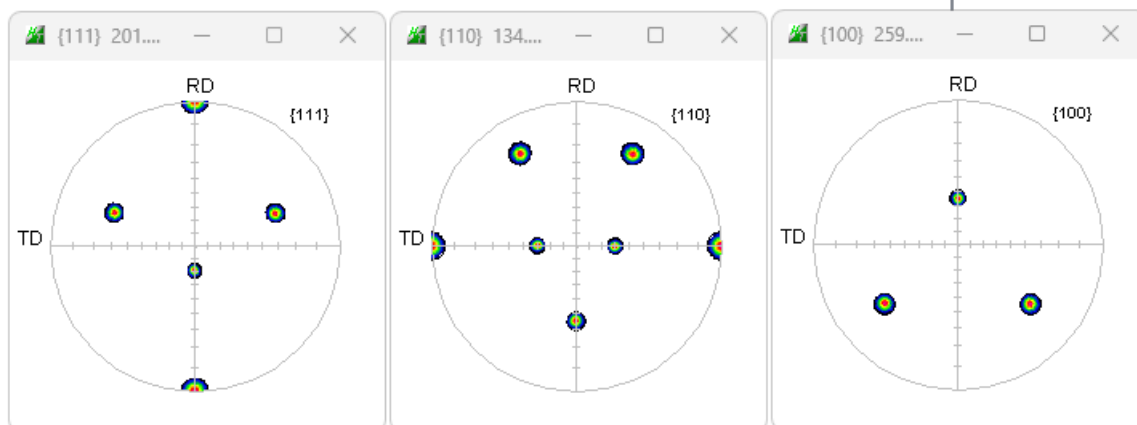
>ori1=setOrientation([1 1 2][-1 -1 1])
>RPF=calcPoleFigure(ori1:[1 1 1],[1 1 0],[1 0 0],1.0)
>plot(RPF:)
>

```

```

ori1:
[1 1 2][-1 -1 1]
:
RPF:
111_ori1_2.TXT
110_ori1_2.TXT
100_ori1_2.TXT
:

```



Orthorhombic 極点図

```

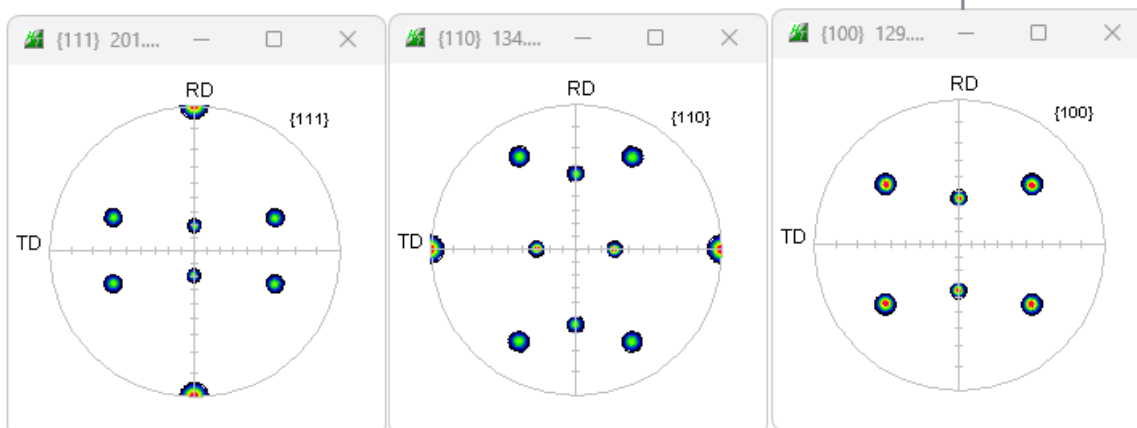
>ori1=setOrientation([1 1 2][-1 -1 1])
>RPF0=calcPoleFigure(ori1:[1 1 1],[1 1 0],[1 0 0]ORTHO,1.0)
>plot(RPF0:)
>

```

```

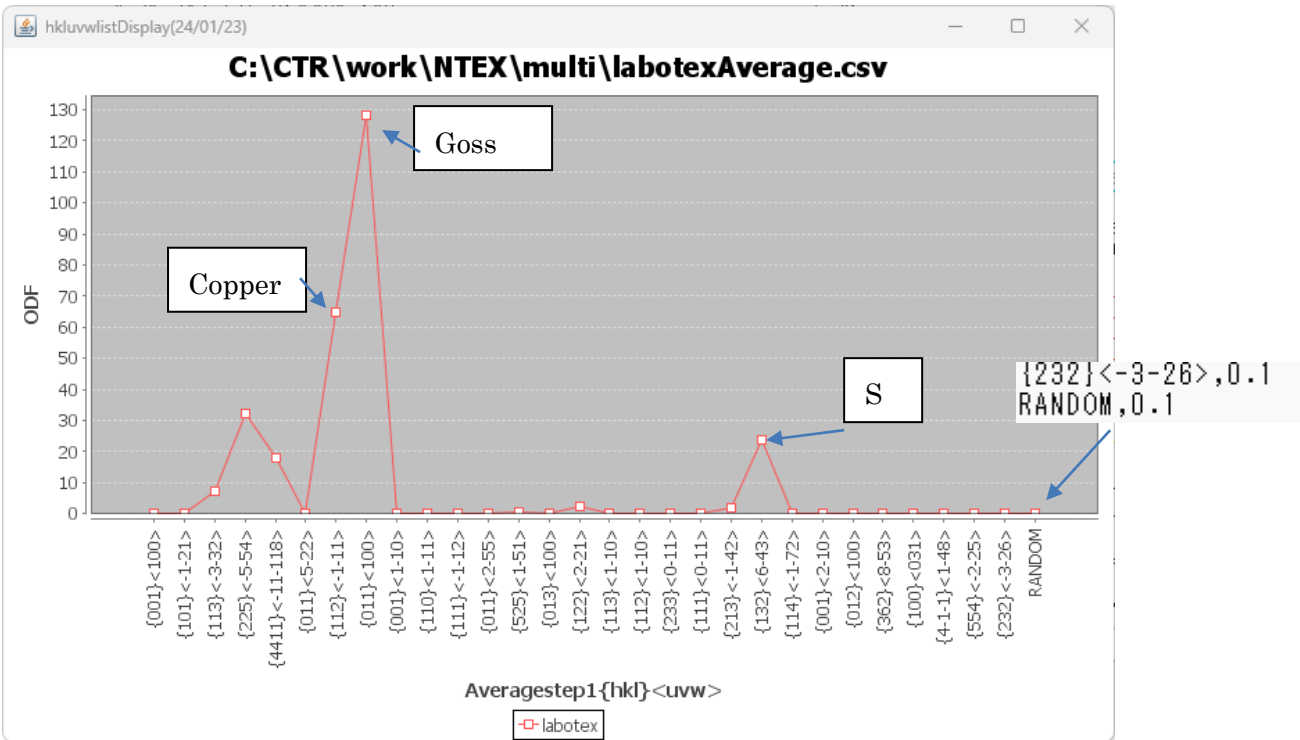
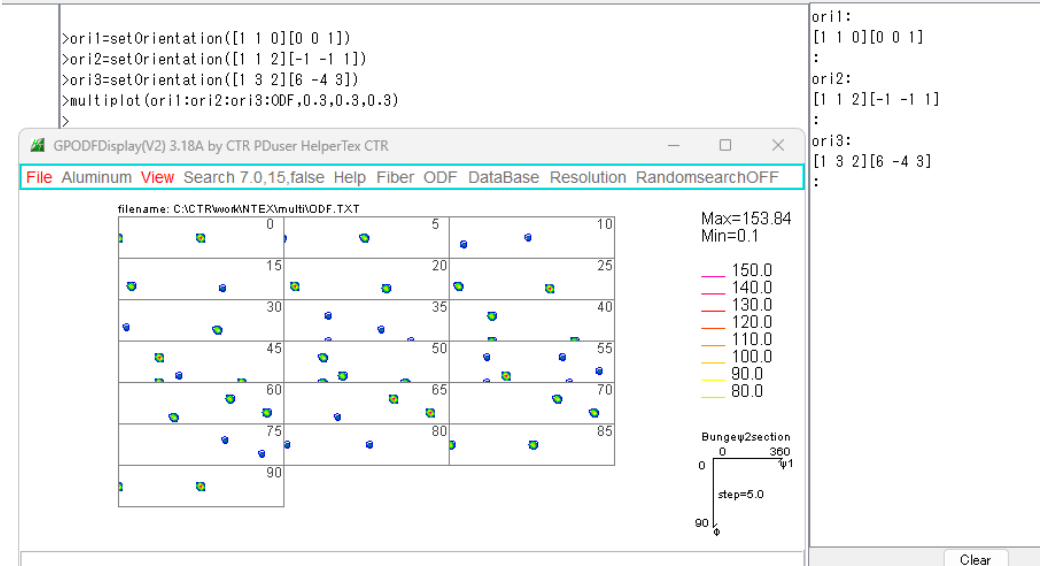
ori1:
[1 1 2][-1 -1 1]
:
RPF0:
111_ori1_2.TXT
110_ori1_2.TXT
100_ori1_2.TXT
:

```



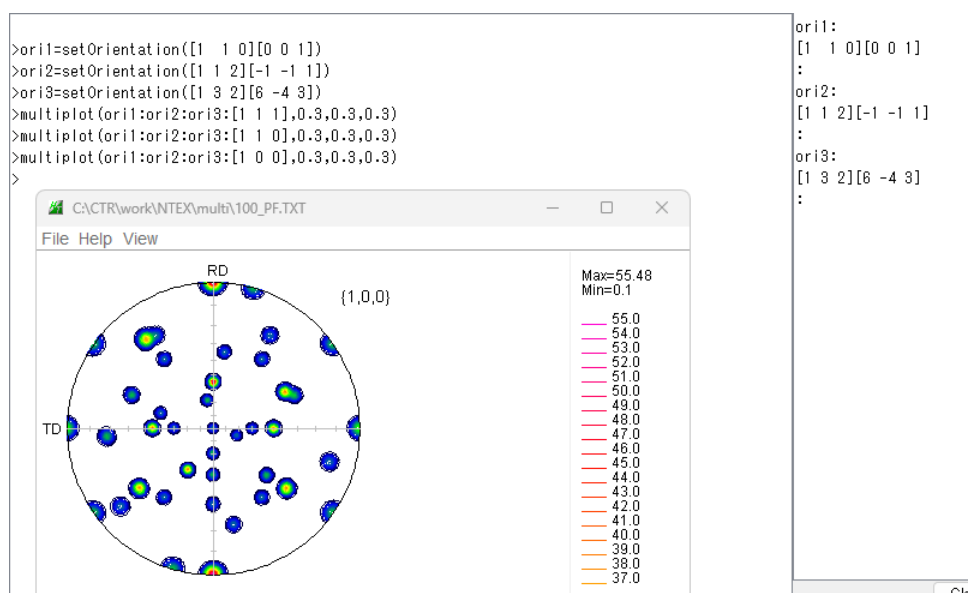
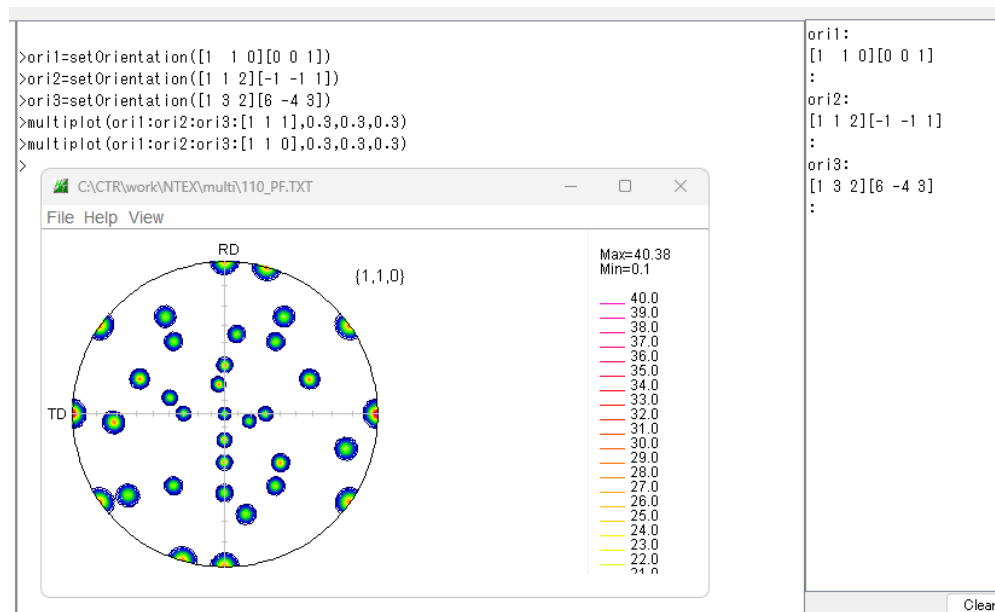
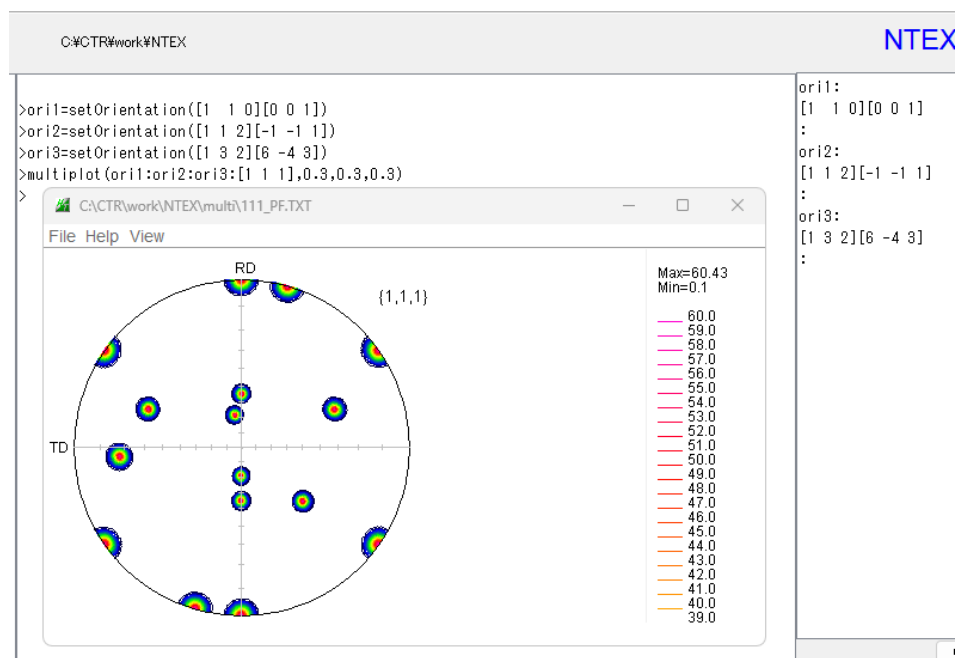
8. *multiplot

複数の方位における方位密度(例：goss：30%、copper：30%、S：30%)



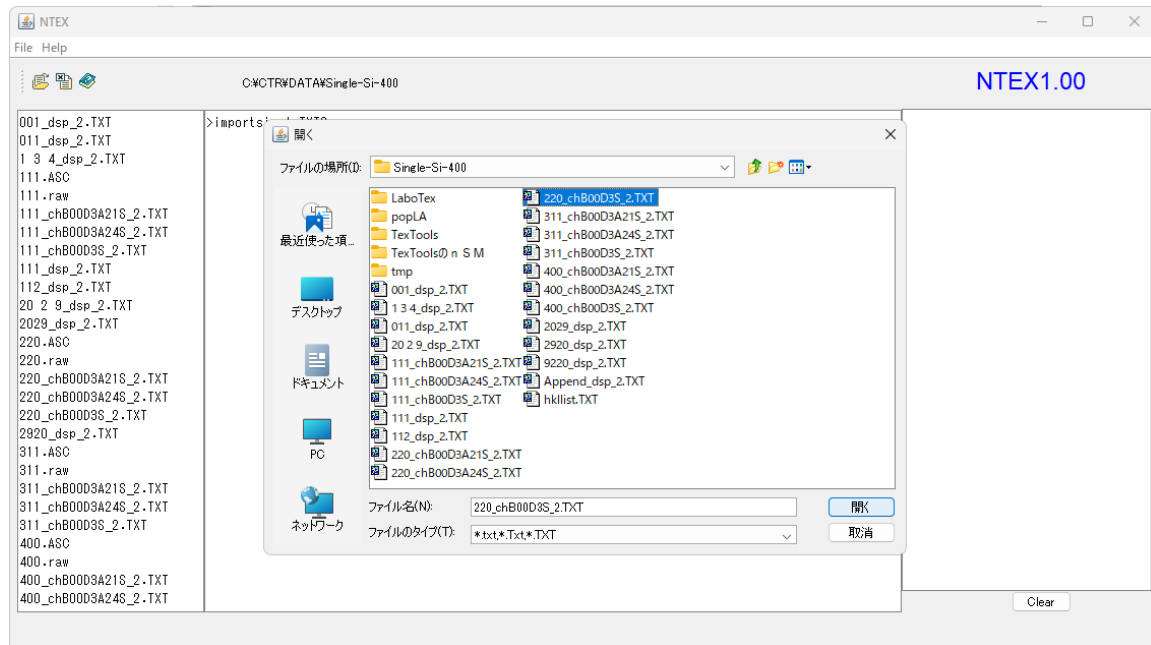
goss：copper＝4：2 S方位は1より低い、ODF図が5度間隔でS方位位置はずれがあるため
goss：30%、copper：30%、S：30%、random10%が計数されている。

極点图描画

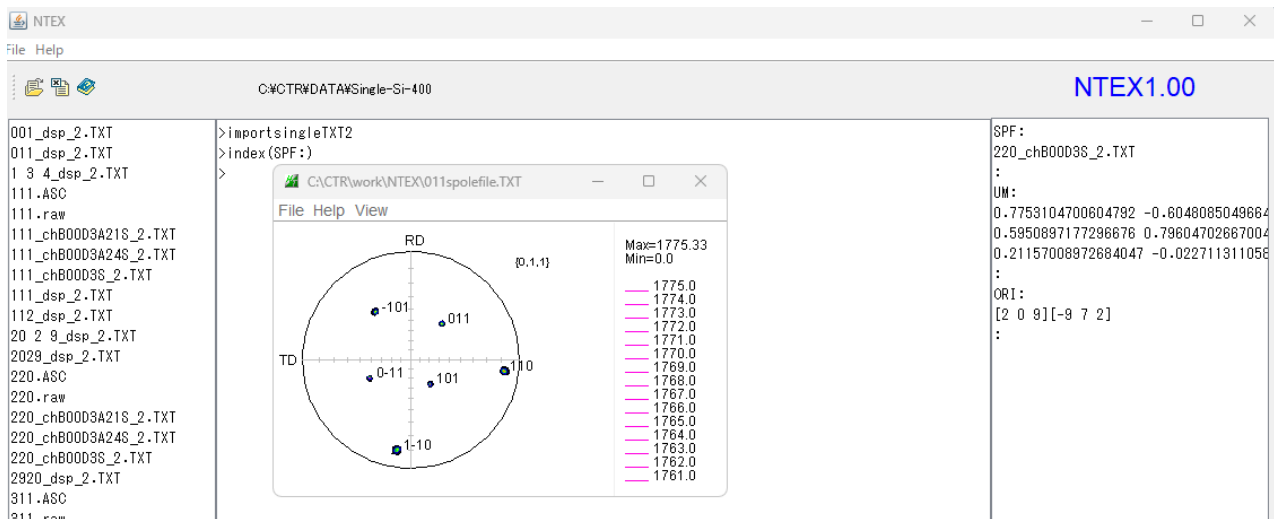


9. *SingleCrystal

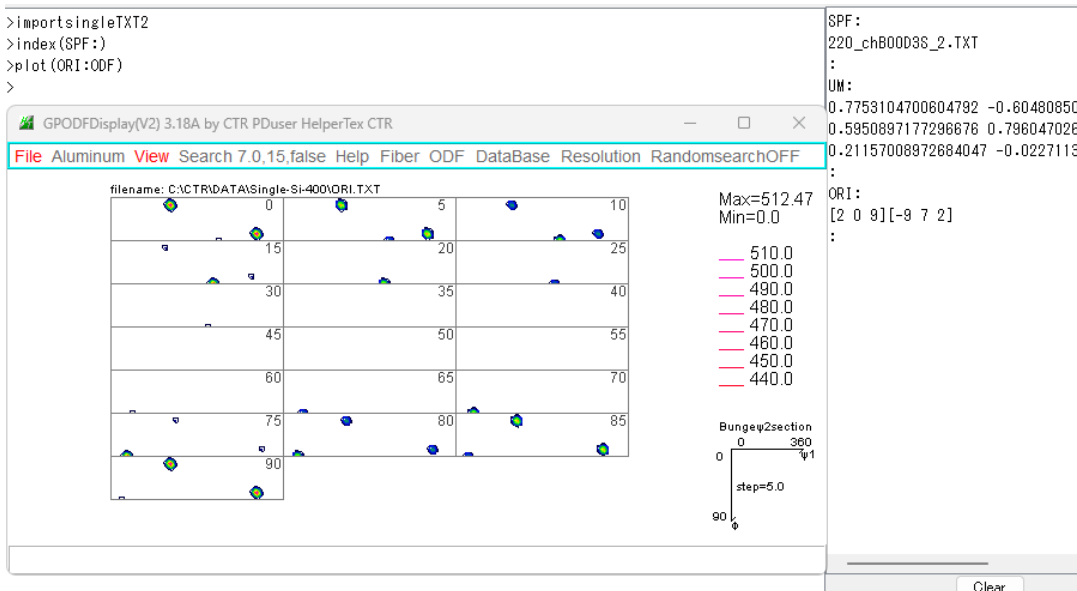
単結晶測定ホルダを指定し、importsingleTXT2にてTXT2ファイルを選択



TXT2ファイルから取り付け方位UM : が計算され、(h k l) [u v w] を決定する。



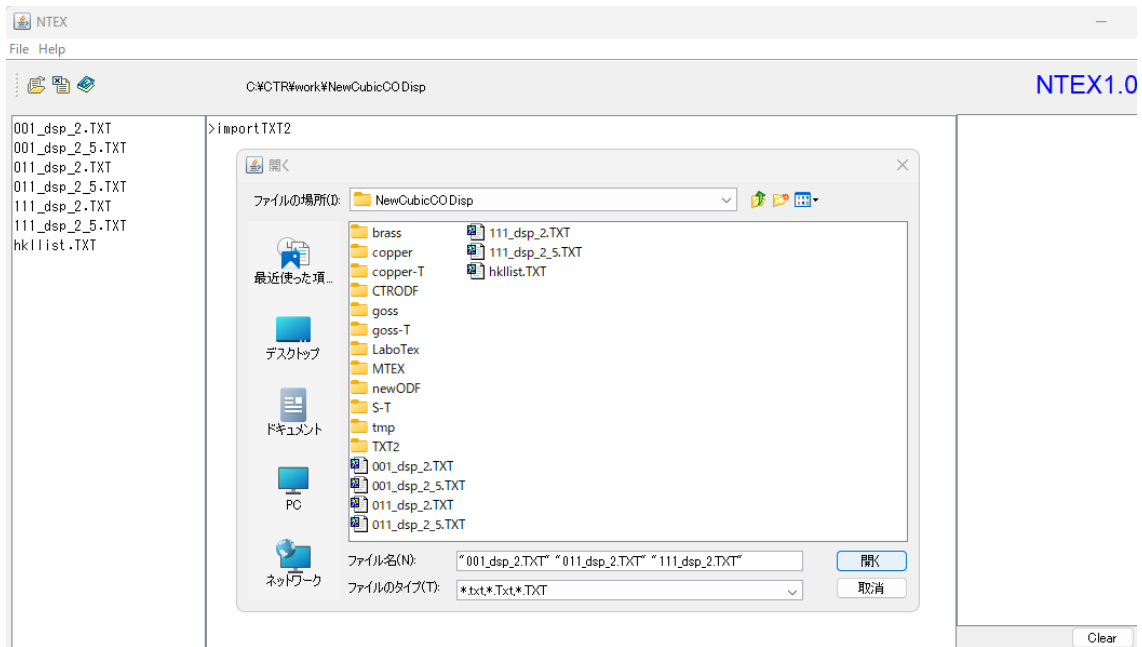
ODFを計算、極点図、逆極点図も同様に計算される。



10. *Polycrystalline substance (MTEX.jarのプロパティ変更)

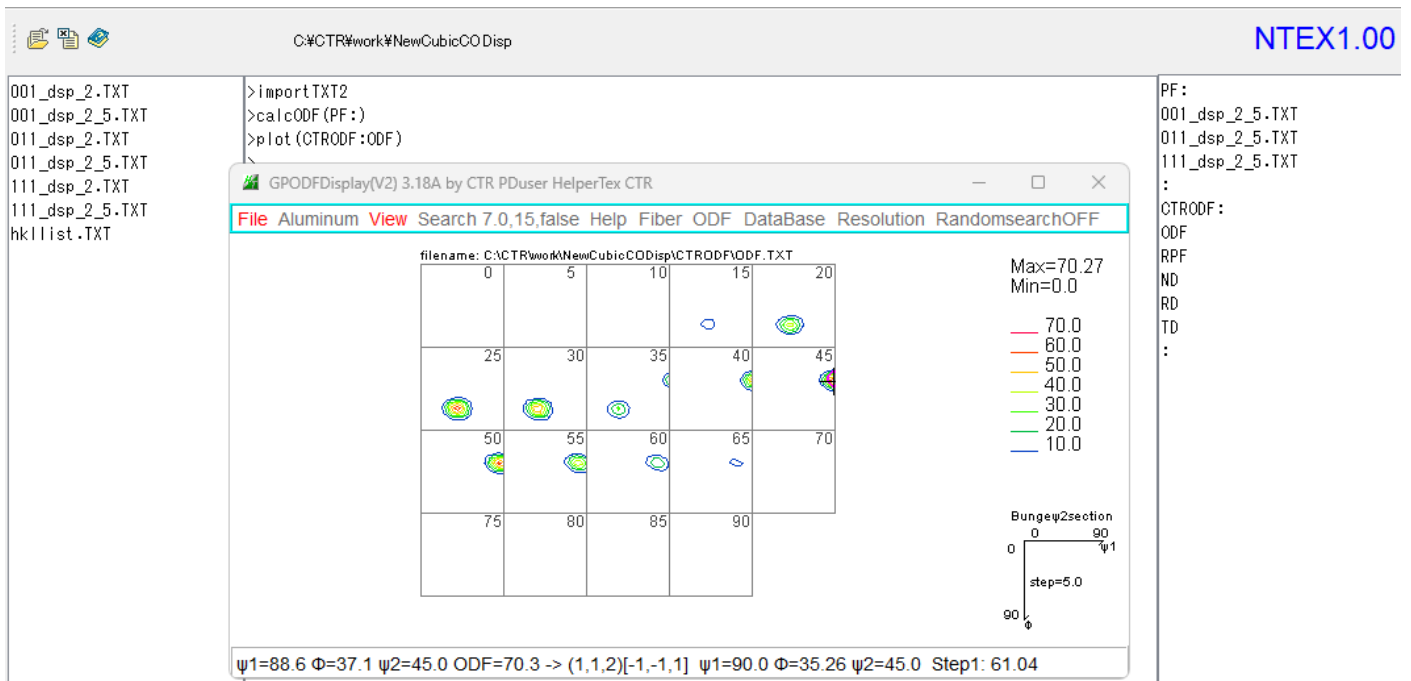
多結晶材料のODF解析 (例: copper 方位単独の極点図からODF解析)

>importTXT2



calcODF(PF:)

plot(CTRODF:ODF)



同様に、>p l o t (C T R O D F : R P F) で再計算極点図

> p l o t (C T R O D F : N D) でND方向逆極点図描画が行えます。

11. *SchmidFactor

```
*schmidFactor
setDirection(A ro P or M)
setFCC
setBCC(1:2:3:)
calc(FCC:[h k l])
calc(BCC:[h k l])
disp(FCC:)
disp(BCC:)
```

FCC, BCCのschmid因子シミュレーション

setDirectionにて、方向を指定

A → Abs

P → Plus (引っ張り方向)

M → Minus (圧縮方向)

setFCCにて

滑り方向{111}<1-10>を指定

setBCC(1:2:3:)

1: {011}<11-1>

2: {112}<11-1>

3: (123)<11-1>

calc(FCC:[hkl]),calc(BCC:[h k l])

[h k l]ですべり面指定

disp(FCC:), disp(BCC:)

ステレオ三角形にschmid因子等高線描画)

C:\CTR\work\NTEX
NTEX1.00

```
>setFCC
>setBCC(1:2:3:)
>setDirection(P)
>calc(BCC:[1 2 3])
>
```

```
FWHM:
2.0
:
Symmetry:
Triclinic
:
ori:
[1 1 0][0 0 1]
:
FCC:
[1 1 1][1 -1 0]
:
BCC:
[0 1 1][1 1 -1]
[1 1 2][1 1 -1]
[1 2 3][1 1 -1]
:
Direction:
Plus
:
```

File Help
— □ ×

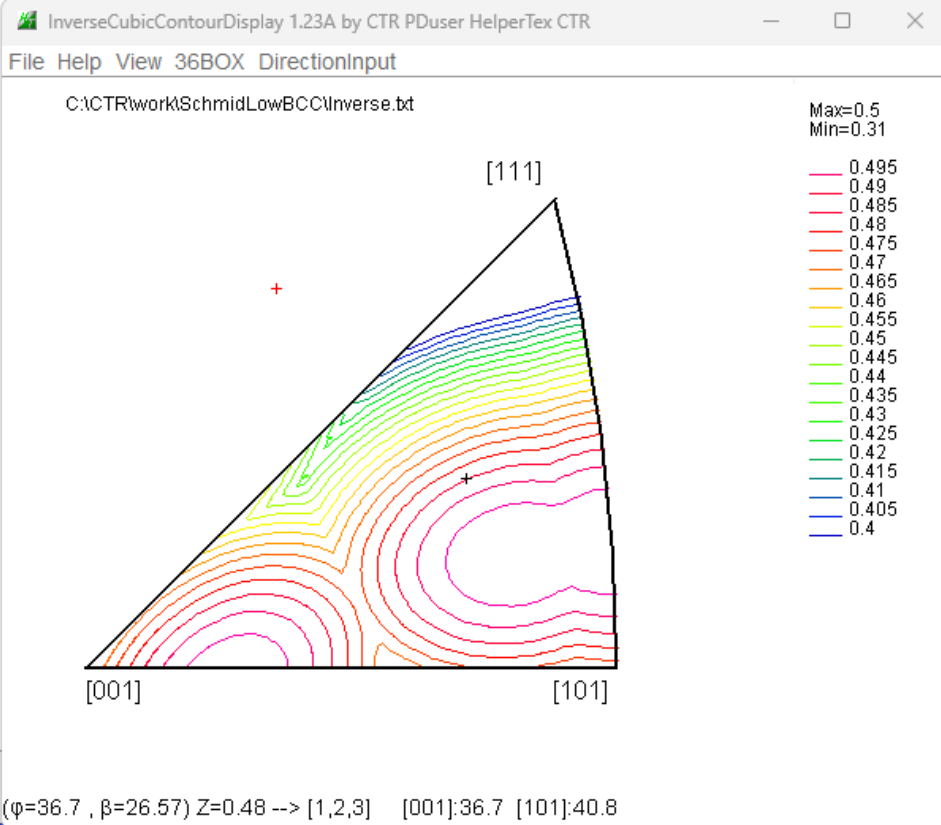
Input	max(Plus)	Slipsystem
[1.0 2.0 3.0]	0.485	(312)[-111]

SlipSystem	SF
(01-1)[111]	-0.175
(-101)[111]	0.35
(1-10)[111]	-0.175
(0-1-1)[-1-11]	0.0
(101)[-1-11]	0.0
(-110)[-1-11]	0.0
(01-1)[-111]	-0.117
(101)[-111]	0.467
(-1-10)[-111]	-0.35
(0-1-1)[1-11]	-0.292
(-101)[1-11]	0.117
(110)[1-11]	0.175
(-211)[111]	0.303
(1-21)[111]	0.0
(11-2)[111]	-0.303
(2-11)[-1-11]	0.0
(-121)[-1-11]	0.0
(112)[-1-11]	0.0
(211)[-111]	0.471
(-1-21)[-111]	-0.135
(-11-2)[-111]	-0.337
(-2-11)[1-11]	-0.034
(121)[1-11]	0.269
(1-1-2)[1-11]	-0.236

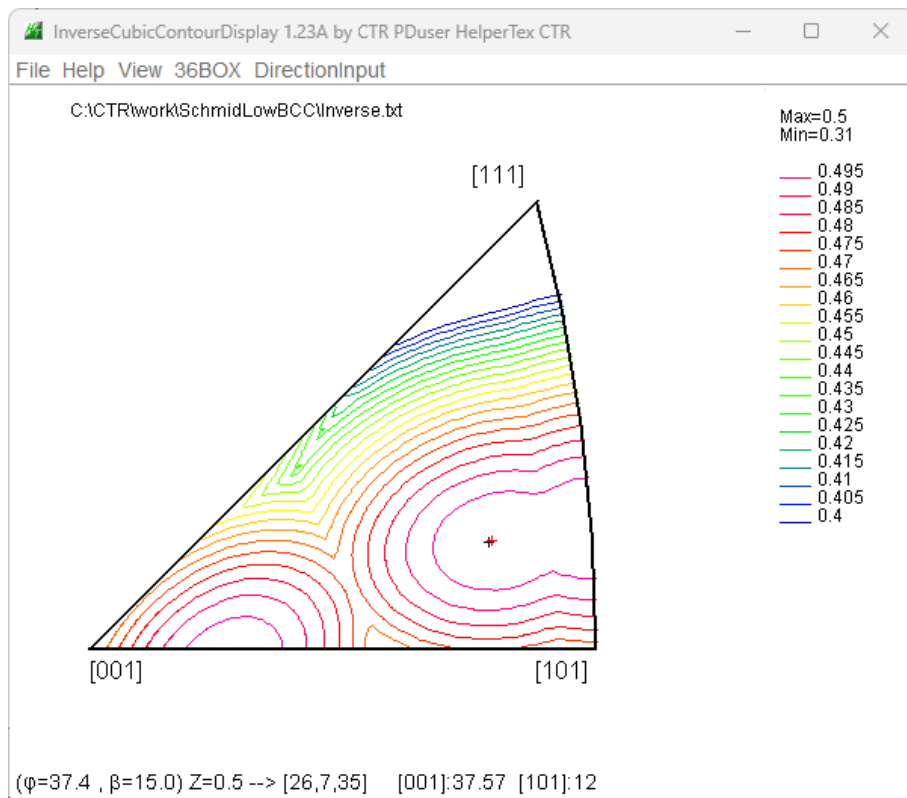
Clear

```
>setDirection(P)
>setBCC(1:2:3:)
>disp(BCC:[1 2 3])
>
```

```
FWHM:
2.0
:
Symmetry:
Triclinic
:
ori:
[1 1 0][0 0 1]
:
Direction:
Plus
:
BCC:
[0 1 1][1 1 -1]
[1 1 2][1 1 -1]
[1 2 3][1 1 -1]
:
```



最大值



まとめ

コマンドによりODF図など描画を可能にしました。

画面を持たないので、簡単に拡張可能なため、機能確認など考えてみます。