

HexagonalとOrthorhombic

2025年01月13日

HelperTex Office

1. 概要

Hexagonalの合金の表面にOrthorhombic合金が作成された場合を考えた場合Hexagonalの底面の上でOrthorhombicもc軸配向の傾向が考えられる。すなわち、Hexagonal {001} <100>でOrthorhombicも {001} <100>を極点図でシュミレーションを行う。

以前は、LaboTexやMTEXのシュミレーション機能で説明を行っていたが、CTRソフトウェア内で説明できるようにソフトウェアの追加変更を行った。

適当な資料がないため、

HexagonalとしてTrigonalであるSiO₂

4. 9209, 4. 9209, 5. 4091, 90, 90, 90

OrthorhombicとしてSeifertite SiO₂

4. 04672, 5. 0462, 4. 4946, 90, 90, 90

を用いる。

Hexagonalの極点図はHexconvert (1. 12) ソフトウェア

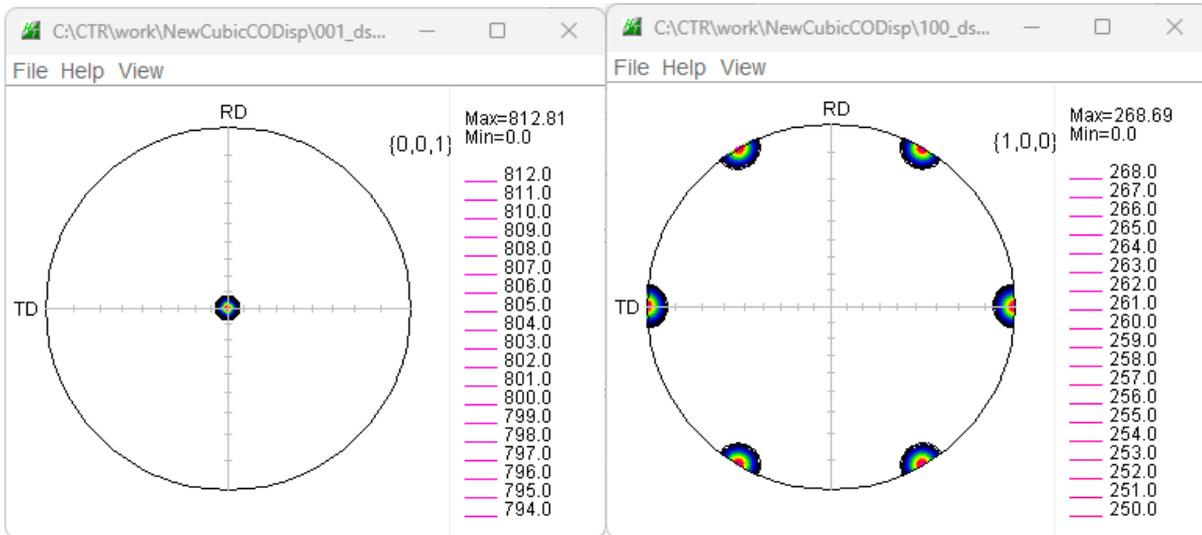
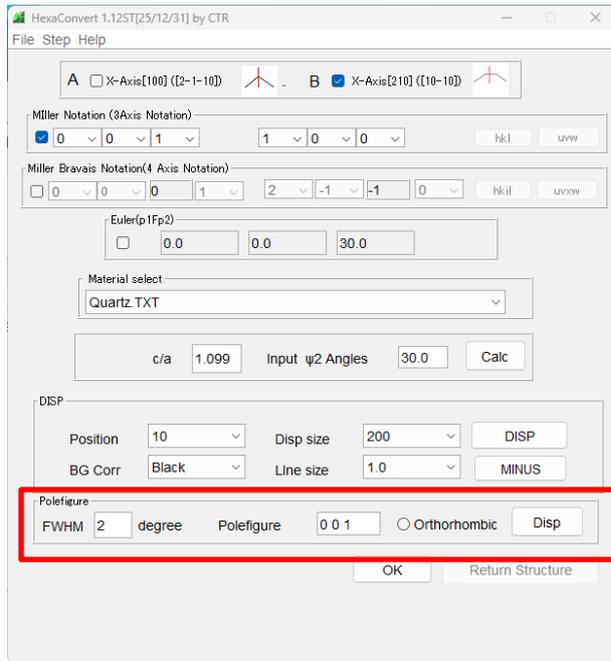
OrthorhombicはCrystalOrientationDisp (2. 08) ソフトウェア

極点図表示に使用したデータは、

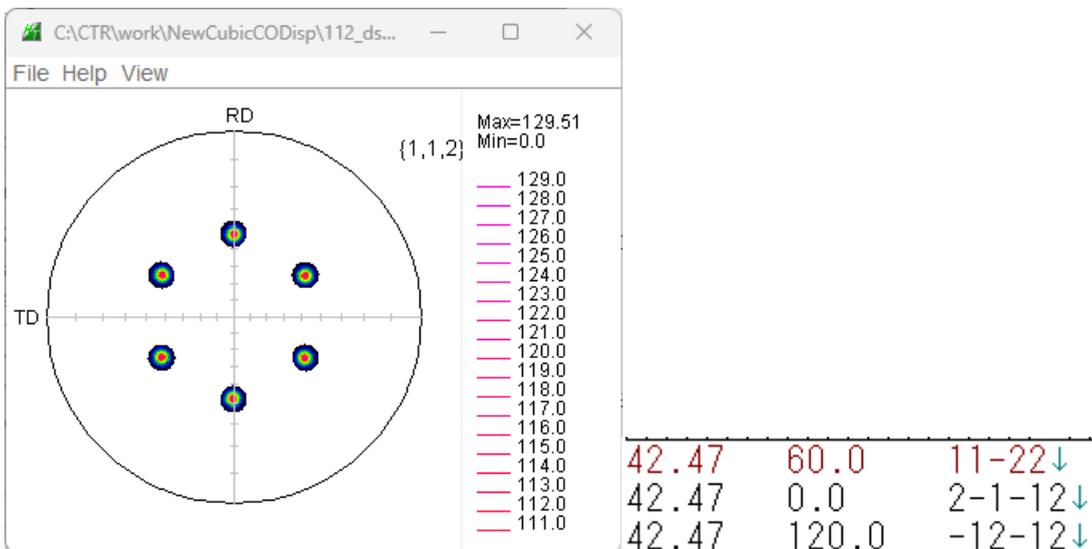
CTR ¥work ¥NewCubicCODispホルダに保存されます。

Calcで削除されます。

2. Hexagonalのシミュレーション

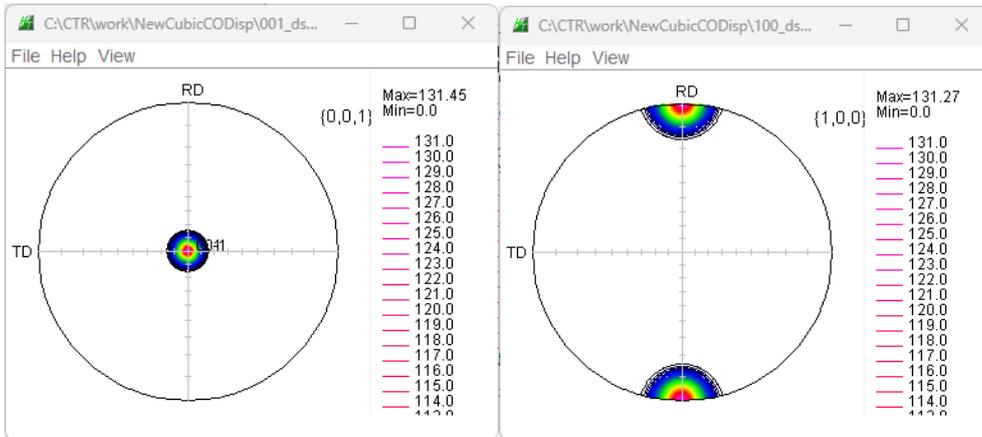
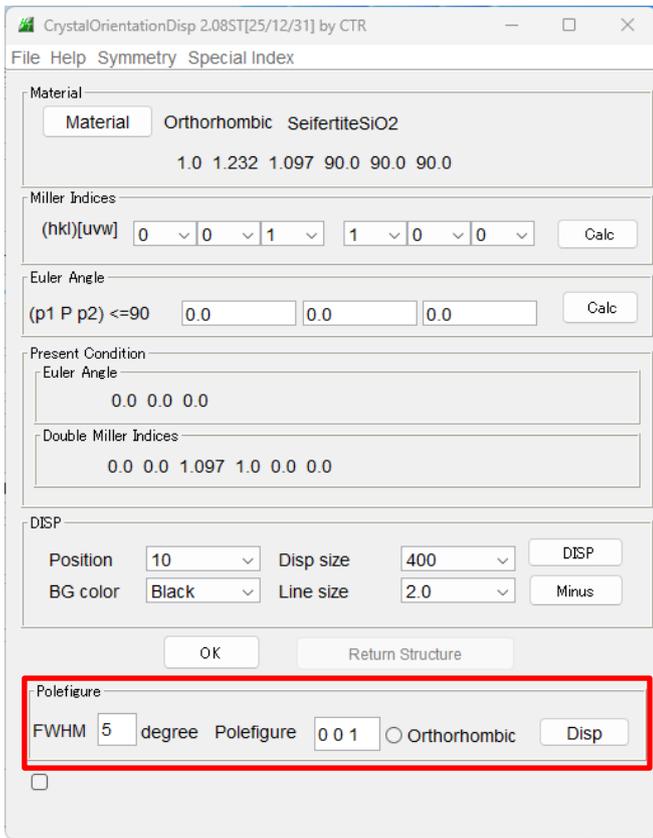


反射極点図であれば $\{001\}$ と $\{112\}$ 極点図

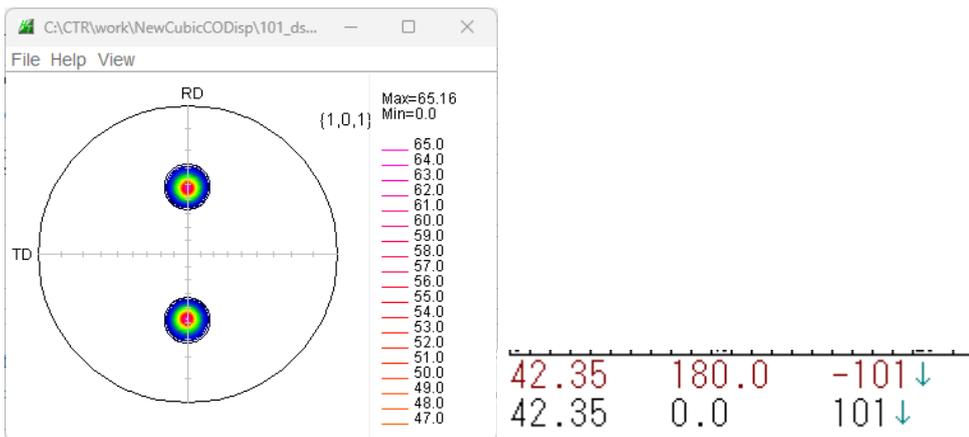


軸比で α 角度が変わる。

3. Orthorhombicのシュミレーション

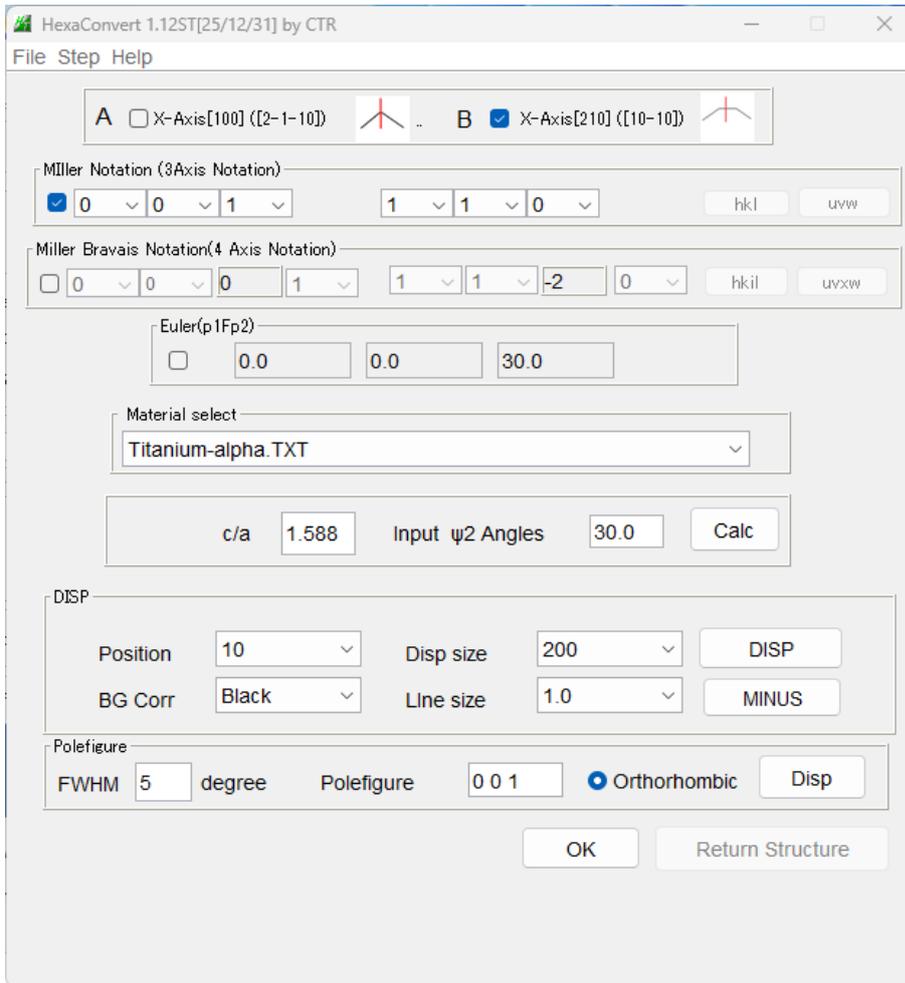


反射極点図であれば、 $\{001\}$ と $\{101\}$ 極点図



軸比により α 角度が異なる。

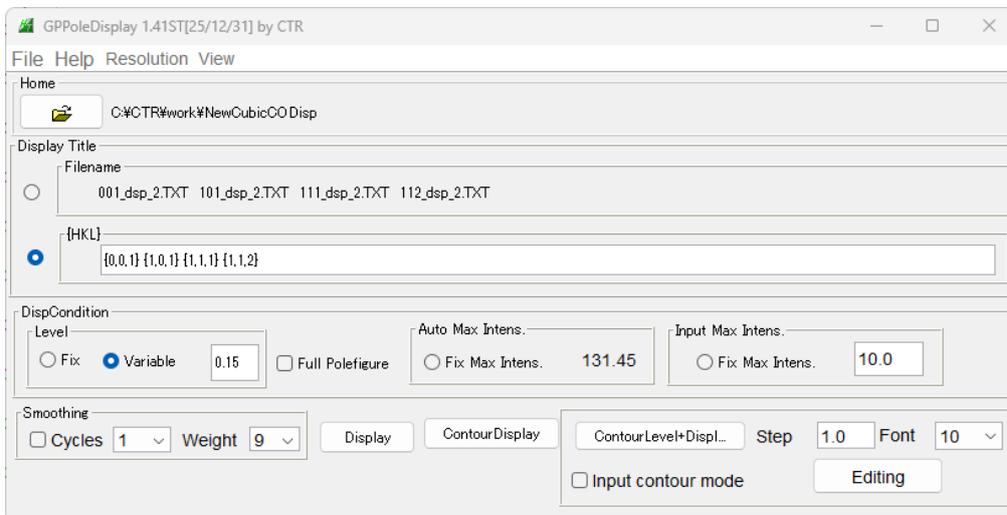
4. 複数の極点図を生成



(0 0 1) [1 1 0] と (0 0 1) [1 - 1 0] から複数の極点図生成比較
 {0 0 1}、{1 0 1}、{1 1 1}、{1 1 2} 極点図を各々作成する。

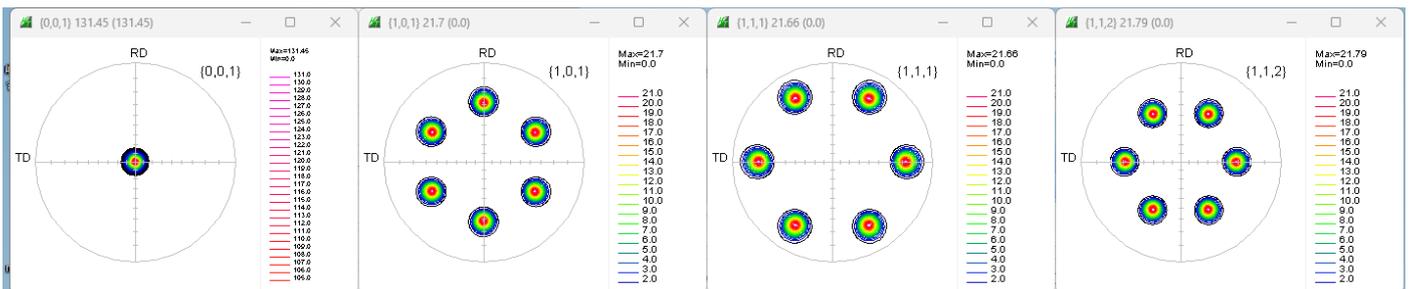
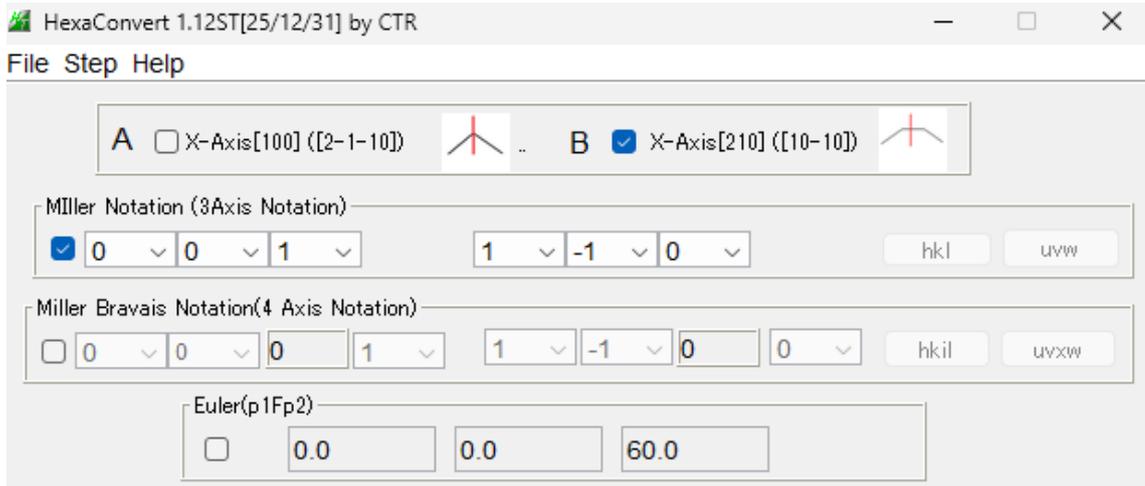
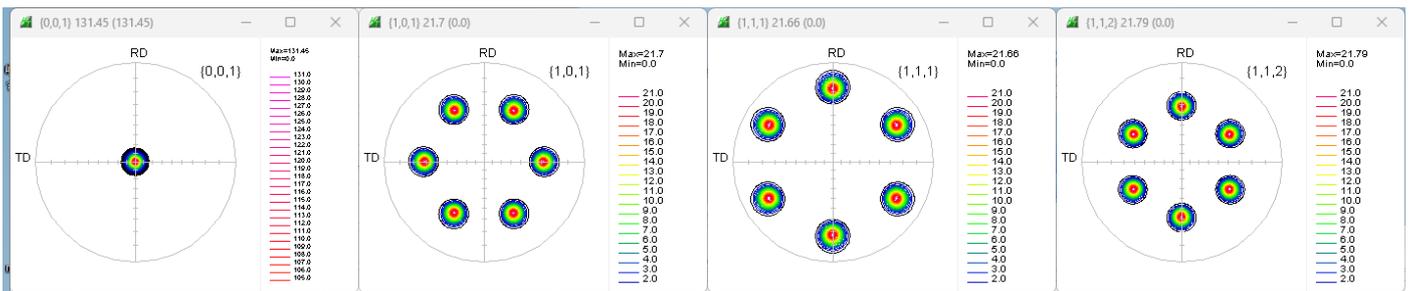
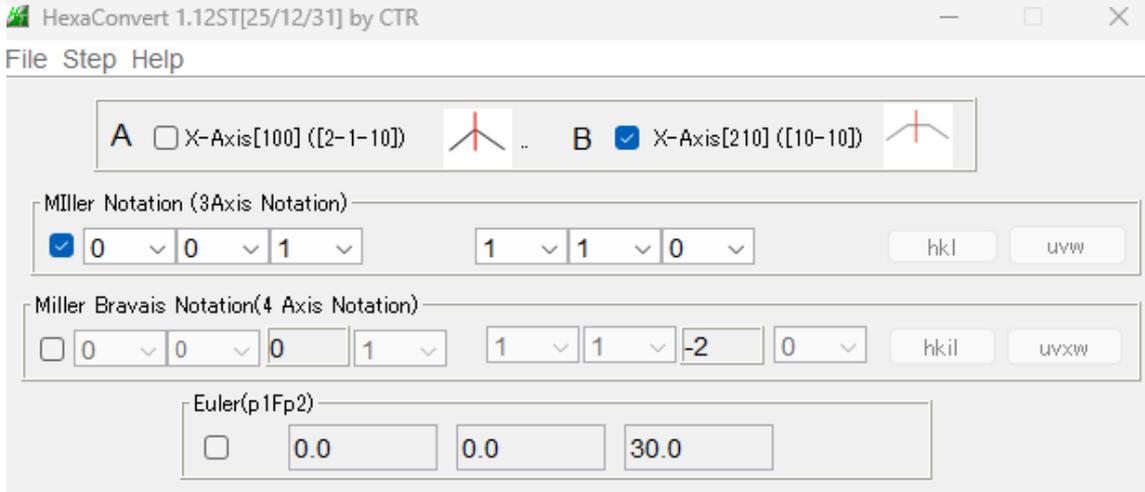
C:\CTR\work\NewCubicCODisp ホルダに TXT 2 極点図が作成される。

GPoleDisplay で表示



$\{001\} \langle 110 \rangle$ と $\{001\} \langle 1-10 \rangle$ の違い

——> $\{0001\} \langle 11-20 \rangle$ と $\{0001\} \langle 1-100 \rangle$ の違い



X軸の取り方では ODF 図は異なるが極点図では影響なし



5. D a t a B a s e

表示には、金属のD a t a B a s eが必要になります。

<https://helpertex.sakura.ne.jp/Soft/DOC4/COD-CrystalOrientationDisp-MTEX.pdf>

を参考にしてください。