## 六方晶の逆極点図表示

InverseDisplayHexaソフトウエア Ver1.10

> 2014年02月02日 *HelperTexOffice*

逆極点図表示方法は(3指数、4指数)、と各方位を{213}あるい[213]と表現する方法がある。「逆極点図が結晶方向に対する方位分布図」であるが、分かりにくい。 例えば、A12O3で{111}<0-11>,{511}<0-11>,{213}<11-1>の方位が含まれる逆極点図は



で、{111}は[55-101]に、{213}は[32-51]に、{213}は[51-60]に表現される。

Plane で表現すると、



と直接表現出来ます。

材料の異方性評価として、逆極点図が用いられる事がある。 逆極点図は、「結晶座標系を基準にして、材料の方位分布を表現」とされている。 これは、「材料のND、TD, RD方向に対する、結晶方位の分布図」と言い換えられる。 測定は、X線回折装置によるBragg-Brentano測定、極点図測定で測定出来る。 測定面をND, TD, RDとすれば、3方向の逆極点図測定が可能になる。 極点図測定の場合、ODF解析すれば、逆極点図描画が出来ます。 逆極点図の描画は、3指数法と4指数法があり、それぞれ以下の関係である。 又、ODF解析ソフトウエアにより、面分布、或いは方向分布を表わしている。



逆極点図を[0001]-[10-10]-[11-20]で表現した場合 [0001]は(001)->{0001} [10-10]は(100)->{10-10} [11-20]は(110)->{11-20}である。

 $\{h k 1\}$ から逆極点角度 $\alpha$ 、 $\beta$ の計算

面分布の場合、

α角度は、(0,0,1)と(h,k,l)の面角度計算を行う。

β角度は、

a s i n ((2 \* h + k) / (2 \* s q r t (h : h + h \* k + 1 \* 1)) 方向分布の場合 α角度は、[001]と[uvw]の方位角度 結晶方位[111]<1-10>,[113]<1-10>,[117]<1-10>の各々の VolumeFraction を10%とした場合 LaboTex では



[]表示ではなく、{}表示される。Planeで表示されている TexToolsでは



指数付けでは、若干、[11-20]方向にずれる。Directionで表示される。

 $\beta = 30 度 O L a b o T e x, T e x T o o l s 比較$ 



逆極点図の表示に関して

L a b o T e x は{1,1,-2,1}T e x T o o l s は[1,1,-2,1]表示を行っている。

## InverseDisplayHexaプログラムでLaboTexの結果表示 LaboTexと同じ{}で表示する。

SinverseDisplayHoxa 1 10YT[14/10/31] by CTR							
File Help PlaneDisp{hkl}							
ODF							
Material     SILICONDIOXIDE.txt     c/a=     1.0925							
Inverse data select WV 資料-DATA-D1 逆極点(大方晶の逆極点図-SiO2V111-113-117=1-10V111-113-117=1-10-inv.TPF ND I							
LaboTex condition set							
Inverse							
Max level 10.83 2D SD Max-value((max 1.0) 0.3 Data Disp List D	Disp						
Window Width     800     Image: Disp Intens. Level     1     [hkl] Intens.     Inverse	Disp						







逆極点図を描画するには、被検試料とrandom試料との強度比を計算出来れば描画出来ます。 測定データをExcelシートに入力し、result.txt(tab区切り)で出力

	A	В	С	D	E	F	G	Н	Ι	J	К	
1	SiO2 Rando	ommode Bg	smpoints=3	Integration	1							
2		[100]	[101]	[110]	[102]	[111]	[112]	[003]	[212]	[301]	[114]	
3	SiO2	0.58	1.8	5.23	3.24	0.58	3.41	0.57	3.54	0.6	0.8	

描画は InverseDisplayHexa ソフトウエア

SinverseDisplayHexa 1.07YT[14/10/31] by CTR	
File Help	
ODF □ LaboTex □ popLA □ TexTools ☑ InverseAll □ Other	
Material Data SILICONDIOXIDE.txt c/a= 1.0925	
Inverse data select SiO2	<b>~</b>
LaboTex condition set [0001]-[10-10]-[11-20]	
_Inverse	
Max level 5.23       2D       3D Max-value((max 1.0)       0.3       Data Disp       List Disp         800       Image: Disp Intens. Random level       0       [hkl] Intens.       Inverse Disp	

