

Tetragonal、Orthorhombic、Hexagonalの逆極点図

ODF解析後の逆極点図に関して、LaboTexとTexToolsの比較を行ってみました。
内部的にはLaboTexはPlaneで解析され、TexToolsはDirectionで解析が行われていますが、Exportされた数値データの加工を行えば、同一データである事が分かります。

LaboTexでは一部不良な部分があり、数値データと等高線が一致していない。
このため、GPInverseDisplayソフトウェアを作成して比較してみました。

GPInverseDisplayソフトウェアでは、
Plane<->Direction切り替え
HCPの3指数<->4指数切り替えが行えます。

Orthorhombicの格子定数の取り方を変えれば、極点図指数、ODF図、逆極点図も変わります。
Hexagonalの直交座標軸を変えてもODF図は変わりますが極点図や逆極点図は同一です。
直交座標軸を変えた同一名の結晶方位は別物なので、ODF図、極点図、逆極点図は変わります。

評価に使用したソフトウェア

LaboTex3.0.31

TexTools3.3

CTR ソフトウェア

2016年01月06日

HelperTex Office

MeasureData¥逆極点図比較¥Inverse-1deg

概要

逆極点図は材料座標系（ND，TD，RD）に対する結晶方位分布図である。

結晶方位{hkl}<uvw>は、材料を圧延した時の圧延方向 RD に平行な方向が<uvw>であり、材料表面に平行な面が{hkl}であるが、逆極点では、例えば、ND 方向は、材料表面の法線方向の分布である。

C u b i c では、材料面と方向は一致するが、C u b i c 以外は一致しない。

今回の説明は、Tetoragonal,Orthorhombic,Hexagonal までとします。

Tetoragonal は、Nd2Fe14B

Tetragonal					
8.792	(1.0)				
8.792	(1.0)				
12.174	(1.3847)				
90.0					
90.0					
90.0					
1.54056					
200					
1	0	1	100.0	7.1276	12.408
1	1	0	1.4	6.2169	14.235
0	0	2	0.5	6.087	14.54
1	1	1	1.3	5.5367	15.994
2	0	0	2.1	4.396	20.183
1	1	2	1.0	4.3494	20.402
2	1	0	8.6	3.9319	22.595
2	1	1	39.3	3.7416	23.761
1	0	3	0.3	3.6845	24.135
2	0	2	16.9	3.5638	24.965
1	1	3	3.7	3.3981	26.203
2	1	2	39.3	3.3028	26.974
2	2	0	12.7	3.1084	28.695
0	0	4	6.1	3.0435	29.321
2	2	1	17.3	3.0118	29.636

Orthorhombic は Polyethylene

Orthorhombic					
2.54	(1.0)				
4.93	(1.9409)				
7.4	(2.9134)				
90.0					
90.0					
90.0					
1.54056					
9					
0	1	1	100.0	4.1029	21.642
0	0	2	35.0	3.7	24.032
0	1	2	5.0	2.9593	30.175
0	2	0	20.0	2.465	36.418
1	1	0	25.0	2.2579	39.893
0	1	3	20.0	2.206	40.875
Orthorhombic					
7.4	(1.0)				
4.93	(0.6662)				
2.54	(0.3432)				
90.0					
90.0					
90.0					
1.54056					
9					
0	1	1	100.0	4.1029	21.642
0	0	0	35.0	3.7	24.032
0	1	0	5.0	2.9593	30.175
0	2	0	20.0	2.465	36.418
0	1	1	25.0	2.2579	39.893
0	1	0	20.0	2.206	40.875

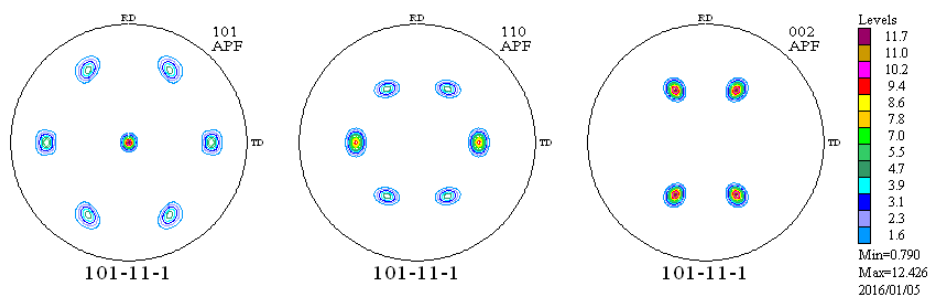
Hexagonal Titanium

Hexagonal					
2.9505	(1.0)				
2.9505	(1.0)				
4.6826	(1.5871)				
90.0					
90.0					
120.0					
1.54056					
9					
1	0	0	25.0	2.5552	35.09
0	0	2	30.0	2.3413	38.416
1	0	1	100.0	2.243	40.17
1	0	2	13.0	1.7262	53.003
1	1	0	11.0	1.4753	62.951

計算は、LaboTex で 1.0deg 間隔の極点図を作成し、TexTools,LaboTex で解析した逆極点図を Export し、GPInverseDisplay ソフトウェアで比較します。

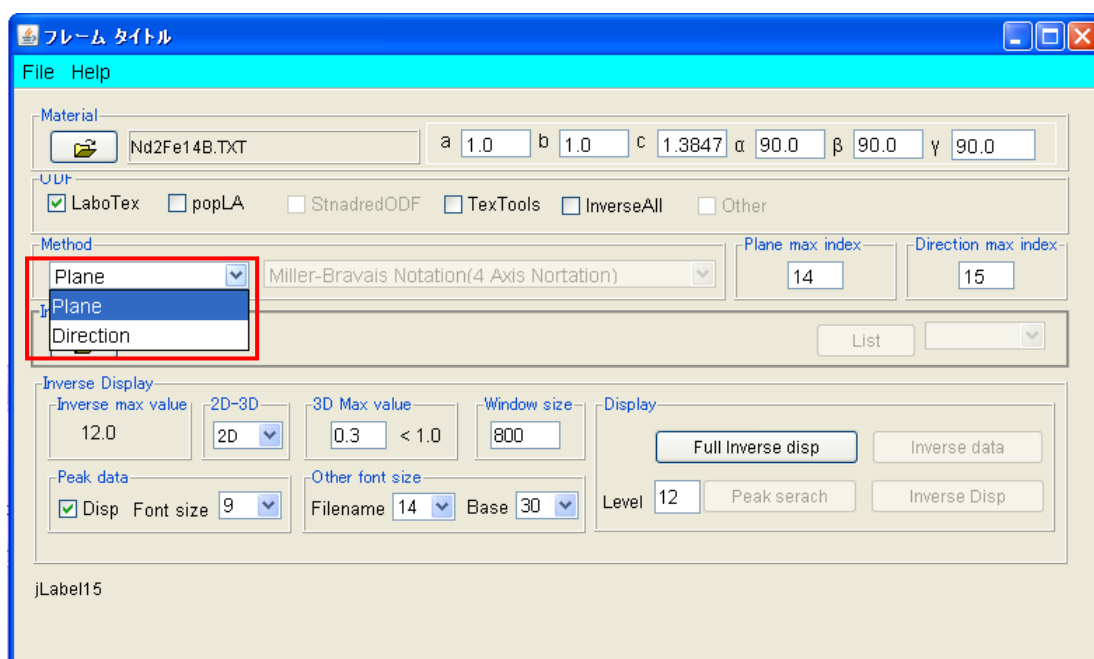
Nd2Fe14B

作成する極点図

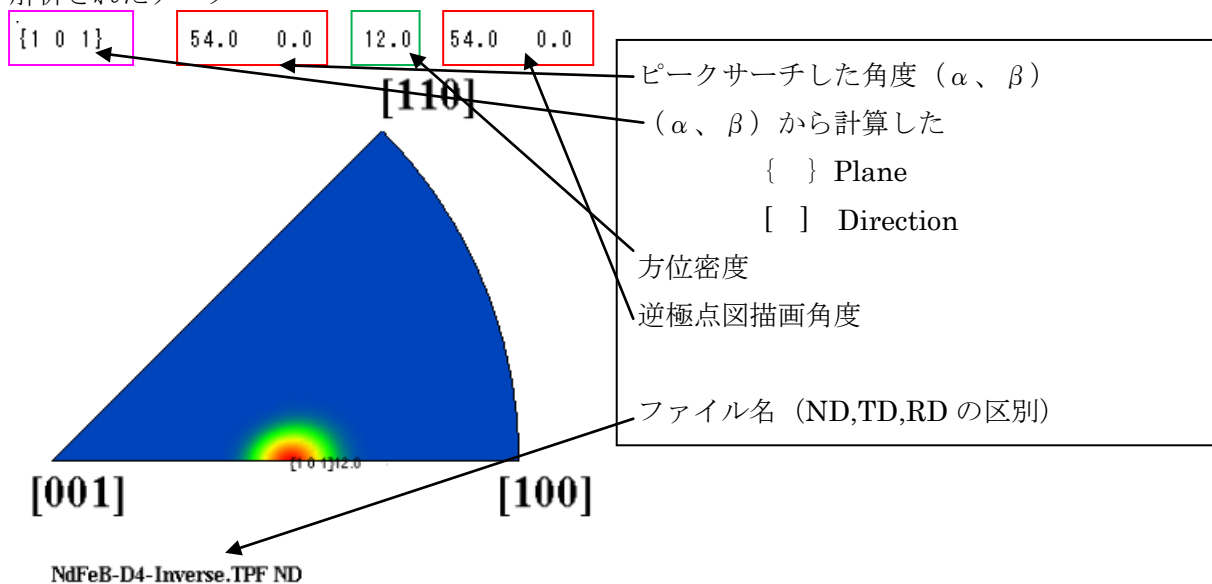


上記極点図を LaboTex、TexTools で ODF 解析を行い、逆極点図を Export し
GPInverseDisplay で逆極点図の解析を行う。

LaboTex は Plane で解析が行われ、TexTools は Direction で解析が行われているが、
Export した数値データは全く同一であることが分かります。



解析されたデータ



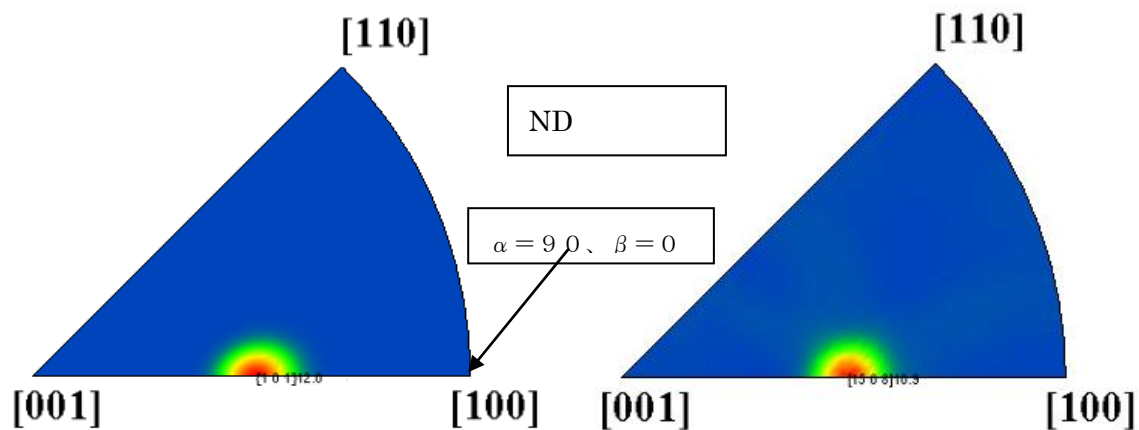
Nd2Fe14B による LaboTex, TexTools 比較 ($\beta = 0$ は右側)

LaboTex 逆極点図

{1 0 1} 54.0 0.0 12.0 54.0 0.0

TexTools 逆極点図

[15 0 8] 54.0 0.0 10.9 54.0 0.0

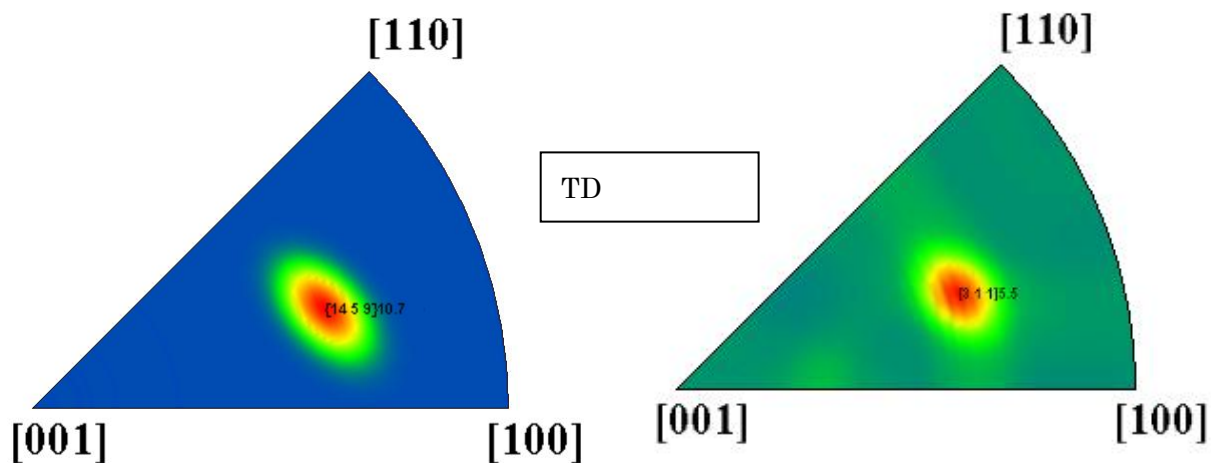


NdFeB-D4-Inverse.TPF ND

{14 5 9} 66.0 19.0 10.7 66.0 19.0

ND.HIPF

[3 1 1] 66.0 19.0 5.5 66.0 19.0

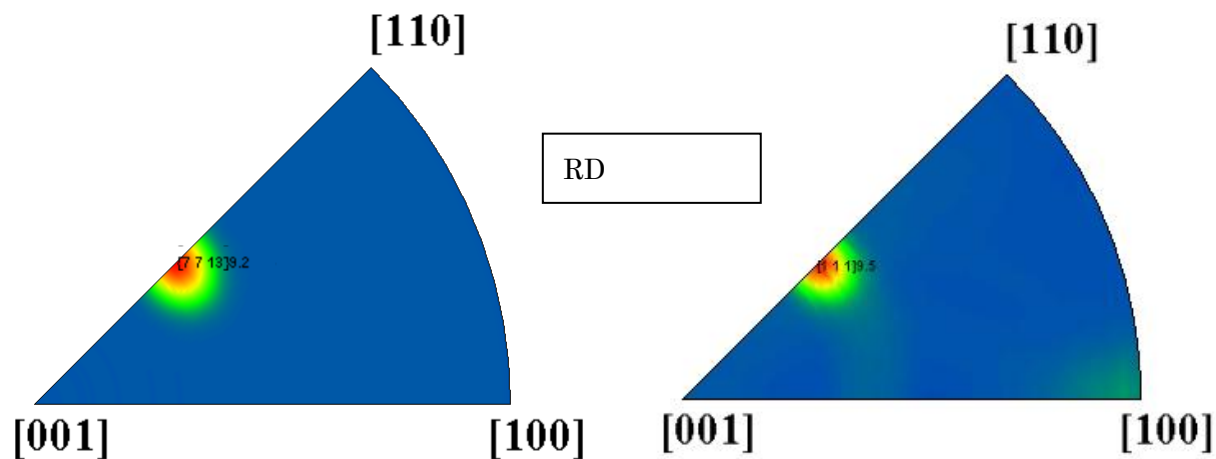


NdFeB-D4-Inverse.TPF TD

{7 7 13} 46.0 45.0 9.2 46.0 45.0

TD.HIPF

[1 1 1] 45.0 45.0 9.5 45.0 45.0



NdFeB-D4-Inverse.TPF RD

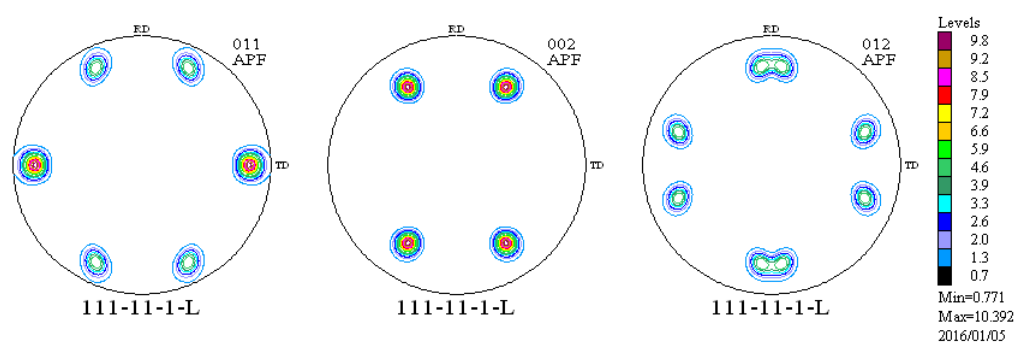
RD.HIPF

LaboTex と TexTools では同じ数値が計算されています。

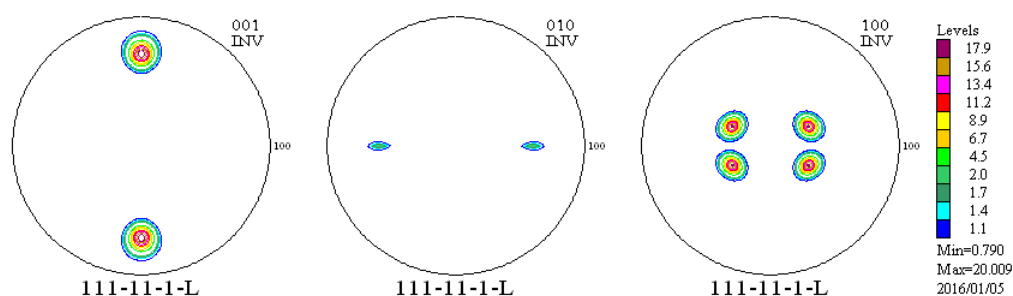
Polyethylene の比較

格子定数は以下のようにする。

2.54	(1.0)				
4.93	(1.9409)				
7.4	(2.9134)				
90.0					
90.0					
90.0					
1.54056					
9					
0	1	1	100.0	4.1029	21.642
0	0	2	35.0	3.7	24.032
0	1	2	5.0	2.9593	30.175
0	2	0	20.0	2.465	36.418
1	1	0	25.0	2.2579	39.893
0	1	3	20.0	2.206	40.875



LaboTexにおける逆極点図



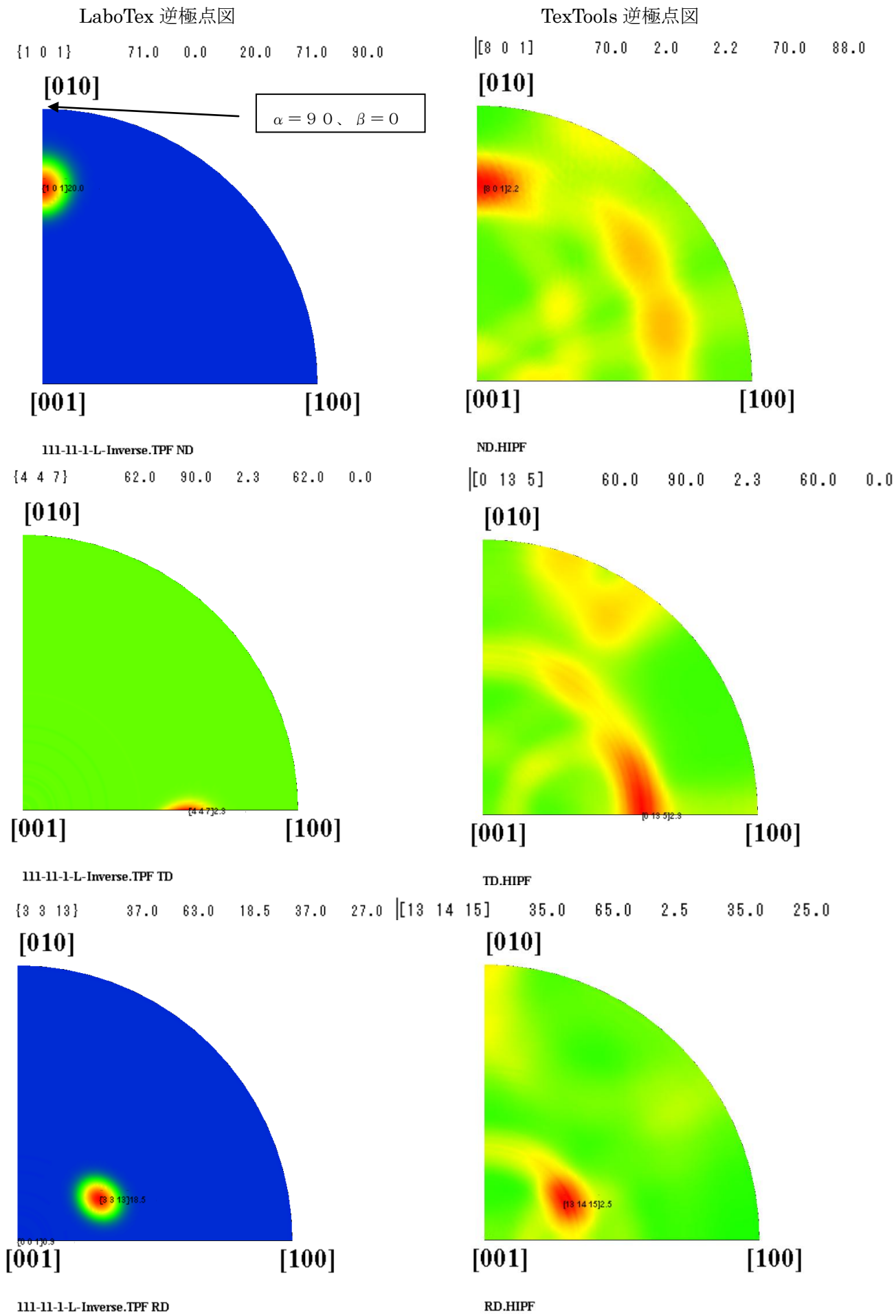
LaboTex では

$a \leq b \leq c$ $\alpha \leq 90$ $\beta \leq 90$ $\gamma \leq 90$ の制限があるため
上記指数極点図を作成してTexToolsで解析を行った。

LaboTex, TexTools 共、同一な逆極点図が描けます。

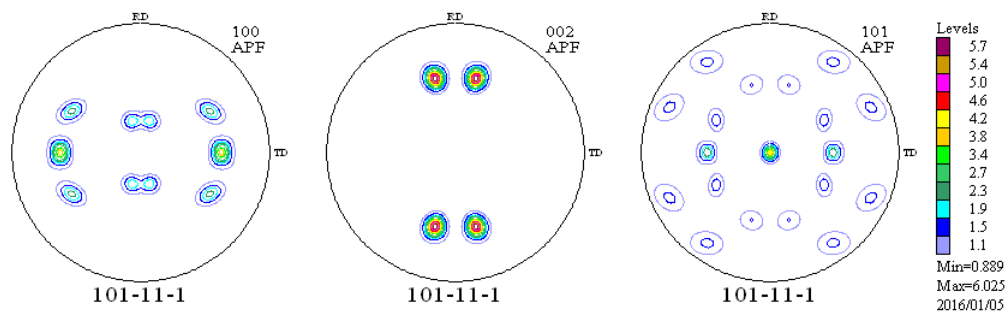
TexToolsで格子定数を別の取り方で極点図指数とした場合、逆極点図の変わります。

Polyethylene の LaboTex, TexTools 比較 ($\beta = 0$ は上面、描画の為 90 度反転)

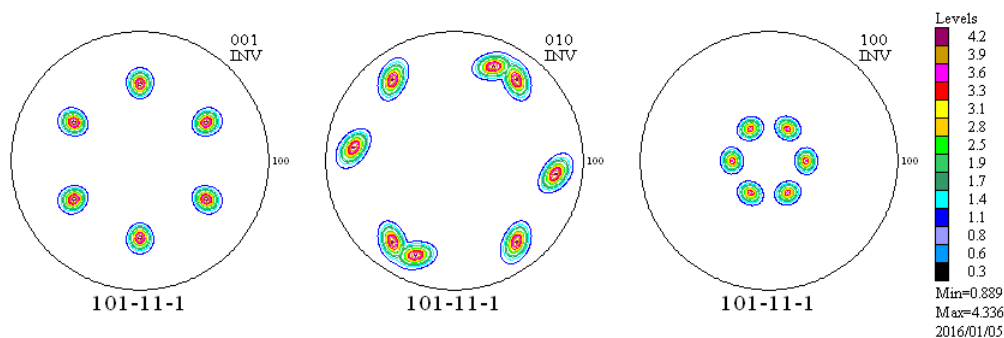


Titanium

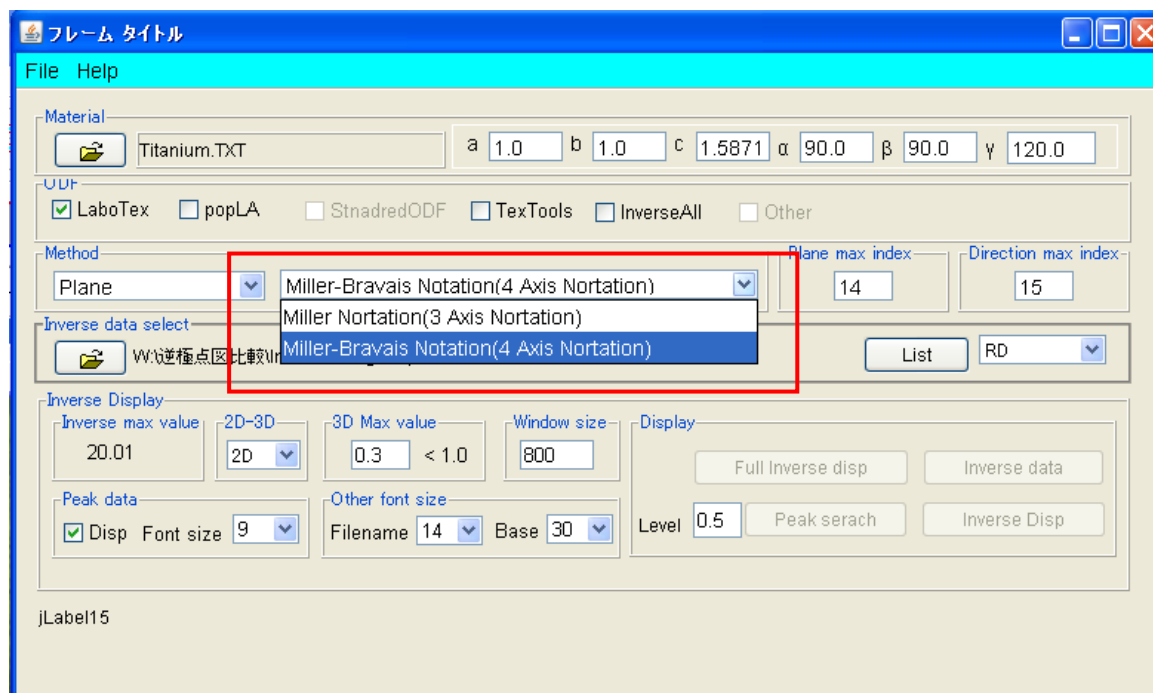
作成した極点図



LaboTex の逆極点図



方位は4指数で行う。



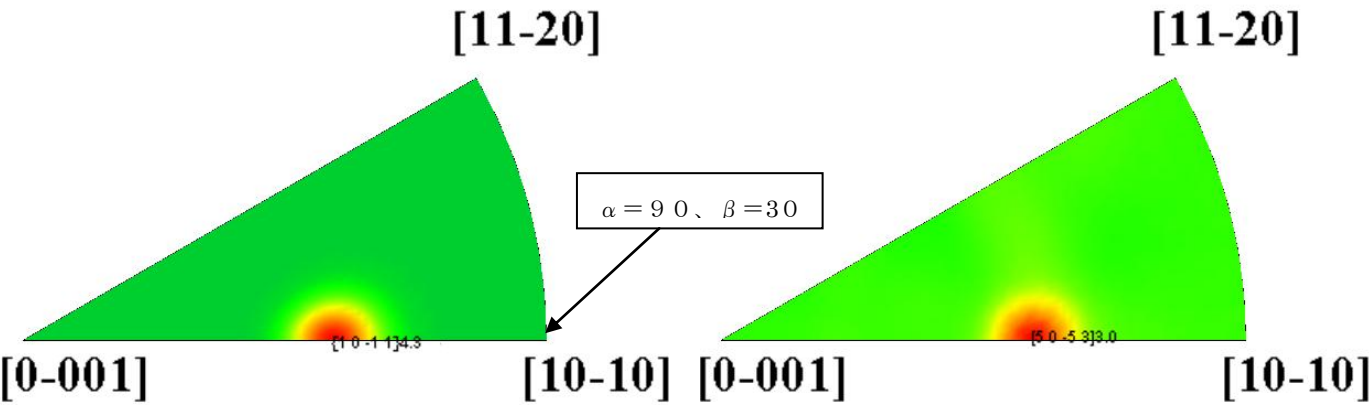
Titanium の LaboTex, TexTools 比較 (逆極点図下面は $\beta = 30^\circ$ 、描画の為 -30°)

LaboTex 逆極点図

TexTools 逆極点図

{1 0 -1 1} 61.0 30.0 4.3 61.0 0.0

[5 0 -5 3] 61.0 31.0 3.0 61.0 1.0

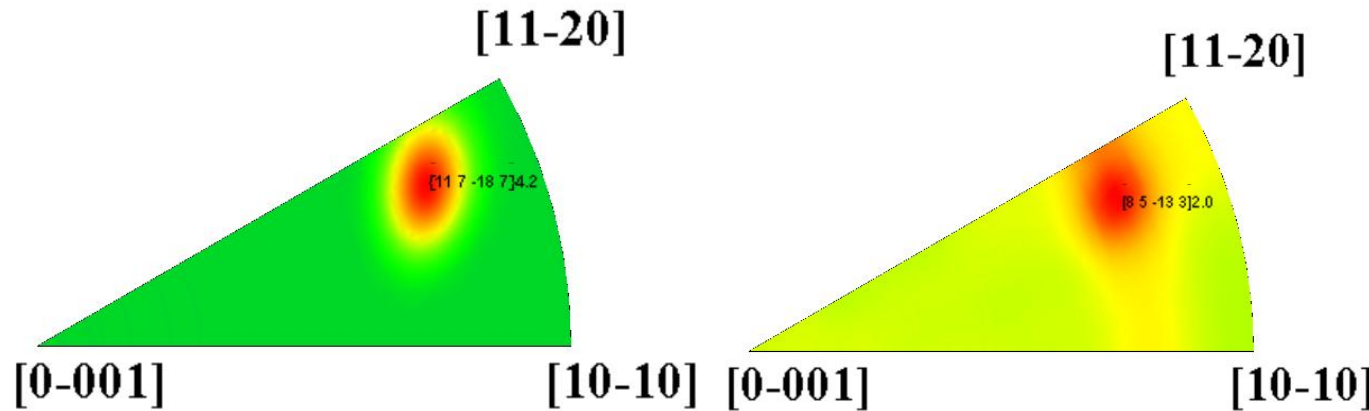


101-11-1-Inverse.TPF ND

ND.HIPF

{11 7 -18 7} 77.0 53.0 4.2 77.0 23.0

[8 5 -13 3] 77.0 52.0 2.0 77.0 22.0

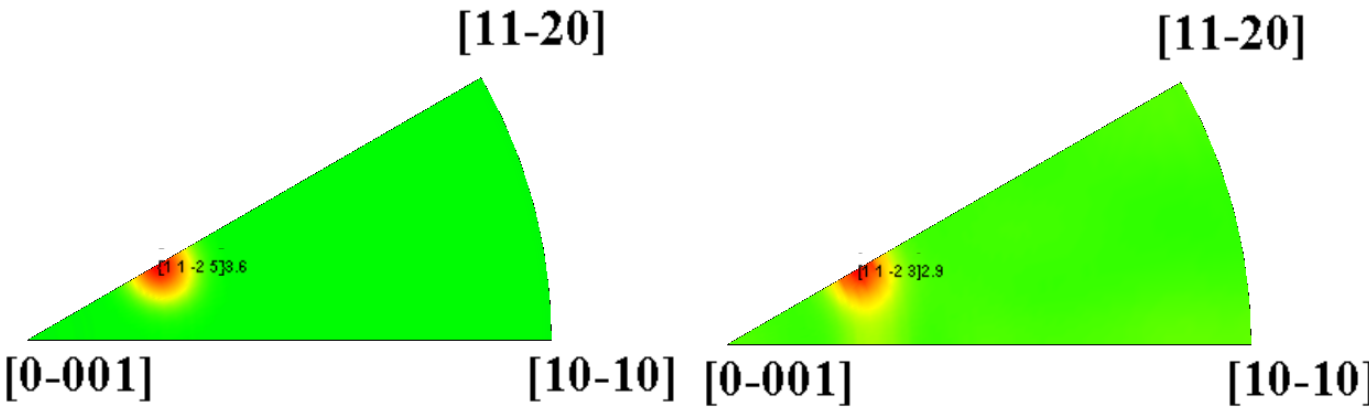


101-11-1-Inverse.TPF TD

TD.HIPF

{1 1 -2 5} 32.0 60.0 3.6 32.0 30.0

[1 1 -2 3] 32.0 60.0 2.9 32.0 30.0



101-11-1-Inverse.TPF RD

RD.HIPF

Polyethylene の RD が<111>にならない理由

LaboTex の方位

{3 3 13} 37.0 63.0 18.5 37.0 27.0

TexTools の方位

[13 14 15] 35.0 65.0 2.5 35.0 25.0

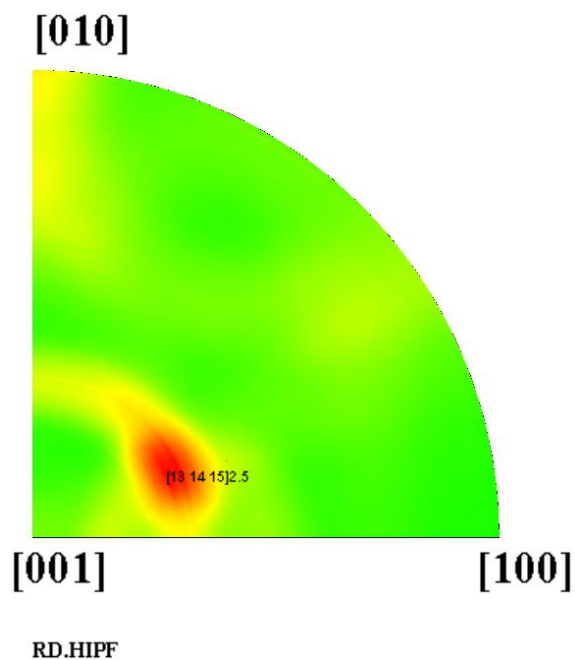
Max index: 15
Method: Plane
Material: Polyethylene.txt
φ: 37 β: 63 [Calc]
37.0 63.0 --> {3 3 13}
Plane
h 3 k 3 l 13 [Calc]
h 1 k 1 t -2 l 0 [Calc]
Direction
Max index: 15 37.0 63.0 --> [1 1 1]
37.0 63.0 --> [1 1 -2 3]

Max index: 15
Method: Direction
Material: Polyethylene.txt
φ: 35 β: 65 [Calc]
35.0 65.0 --> [13 14 15]
Direction
u 13 v 14 w 15 [Calc]
u 1 v 1 t -2 w 0 [Calc]
Plane
Max index: 15 35.0 65.0 --> {3 3 14}
35.0 65.0 --> [4 5 -9 15]

最大指数を小さくすれば一致します。

< 1 1 1 > の方位計算では

Max index: 15
Method: Direction
Material: Polyethylene.txt
φ: 36.85 β: 62.74 [Calc]
36.85 62.74 --> [1 1 1]
Direction
u 1 v 1 w 1 [Calc]
u 1 v 1 t -2 w 0 [Calc]
Plane
Max index: 15 36.85 62.74 --> {3 3 13}



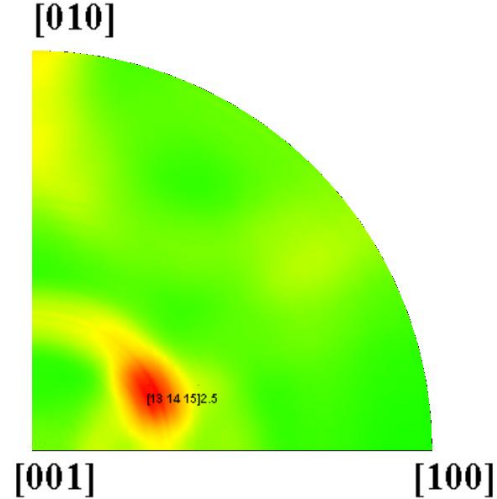
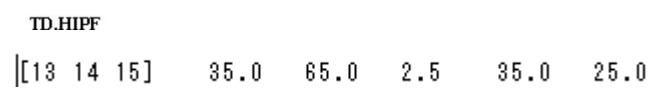
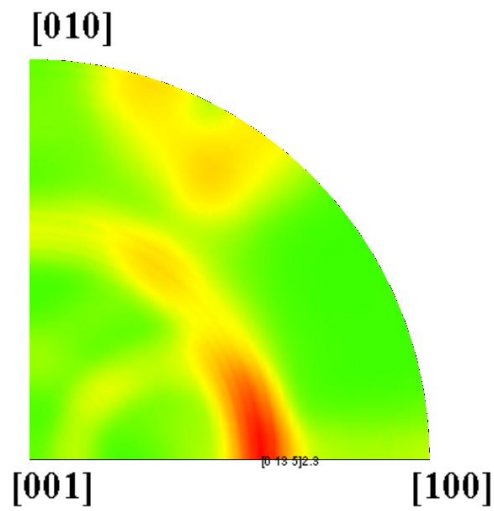
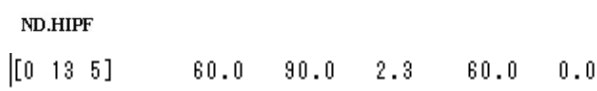
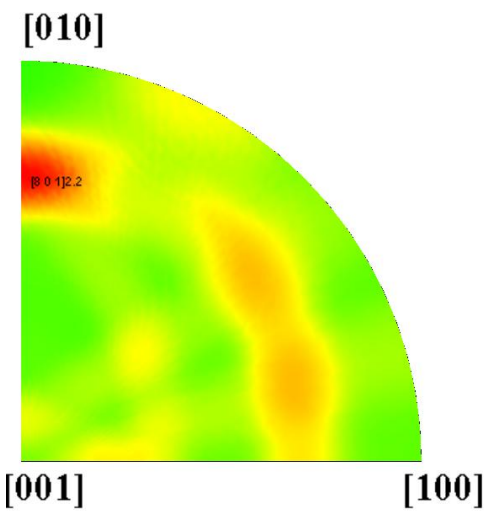
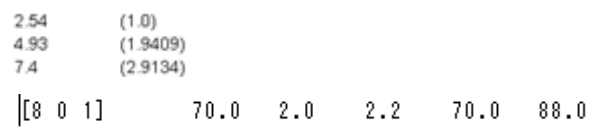
方位角度が (36.85, 62.74) であるなら<111>が計算されるが
図形が流れているため、本来の角度からずれていると考えられる。

LaboTex の計算位置から計算すると<111>が計算されています。

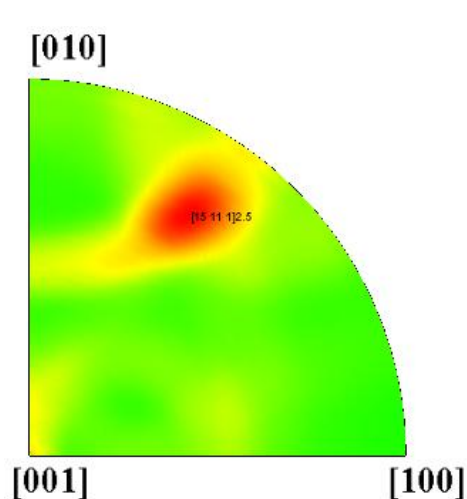
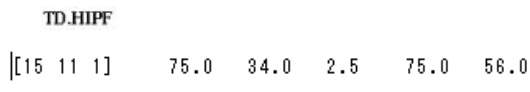
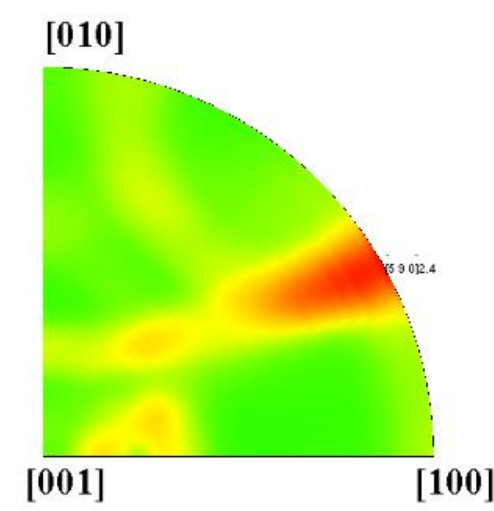
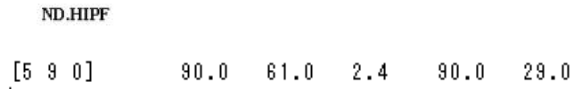
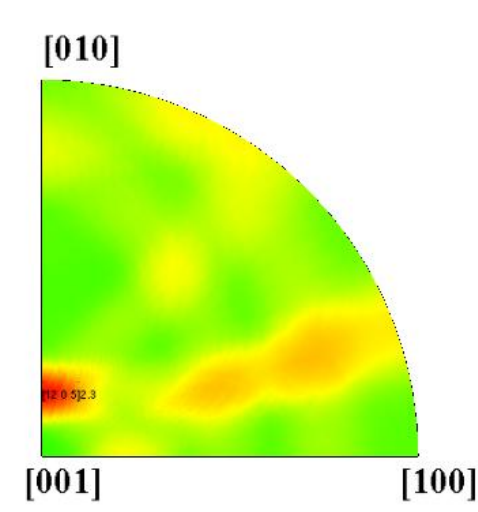
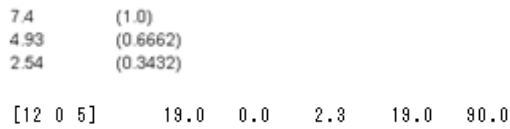
InverseDirectionソフトウェアでは

Cubic, Tetragonal, Orthorhombic, Hexagonalの
逆極点角度 (α、β) <—> 方位 (h k l)、< h k l > の確認が可能

Polyethylene の格子定数を変えた場合、ODF 図と同様に逆極点図も変わります。(極点図は指数のみ変わる)



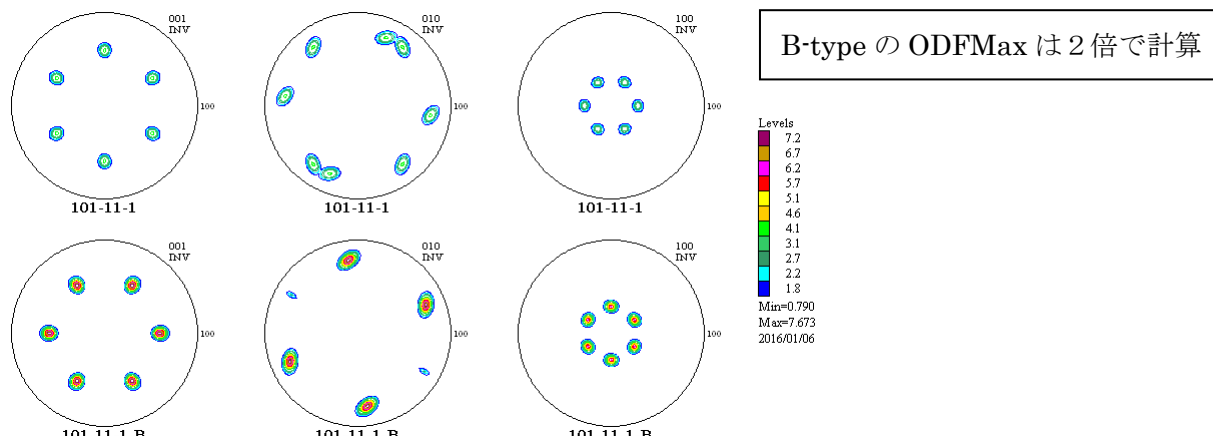
RD.HIPF



RD.HIPF

Titanium の直交座標軸を変えて、各々で $\{101\}<11\cdot1>$ 方位を作成した場合（方位は別物）

LaboTex 上での逆極点図表示は、上段が A-type 、下段が B-type  で変わる。



Export データで検証（最大方位密度は無視してください。最大指数を小さくして計算しています）

