Hexagonalにおける結晶方位の決定

非対称 ODF 図に対応

> 2015年03月29日 *HelperTex Office* 山田 義行 <u>odftex@ybb.ne.jp</u>

不明な点がありましたら、問い合わせください

測定データ0 ¥材料-MG¥LaboTex-Export

目次

- 1. 概要
- 2. Euler角度から {hkl} <uvw>の計算
- 3. LaboTexExportデータ
 - 3.1 A-typeデータをGPODFDisplayで読み込み
 - 3.2 B-typeを選択した場合
- 4. (001)[uv0] (Φ=0.0) の場合
- 5. ODF図のステップ間隔が5. 0以外の場合

1. 概要

ODF解析を行い {hk1} <uvw>を決定する場合、ODF図からEuler角度を読み込み
 結晶方位を決定する事になるが、六方晶の結晶方位表現は複雑である。
 3指数、4指数、X軸の取り方で表現方法は4種類ある。
 この表現を簡単に纏めたソフトウエアが、HexaConvertソフトウエアである。
 又、ODF解析のExport図から結晶方位を決定するソフトウエアが
 GPODFDisplayソフトウエアである。
 本資料では、LaboTexのODFExportファイルから方位決定を説明します。
 (他のODF図も対応しています)
 使用するソフトウエアのバージョンは、
 GPODFDisplayソフトウエア
 1.13
 HexaConvertソフトウエア
 1.08

Cubic, Tetragonal, Orthorombicの場合 HexaConvertソフトウエアの代わりに、 CrystalOrientationDispソフトウエア 2.04

GPODFDisplayソフトウエア

<pre> GPODFDisplay 1.12T[15/10/31] by CTR </pre>
File MagnesiumDISP View Help
LaboTex ODF Export (PHI1 PHI2 PHI ODF) •
TexTools ODF Export
StandardODF (ODF15)
NewODF(f1 F f2 Value)
popLA (Hexa: AType)
DhmsBunge (*.EOD)
Exit

HexaConvertソフトウエア

🗏 HexaConvert 1.08YT[15/10/31] by CTR
File Step Help
A □ x-Axis[100] ([2-1-10])
Miller Bravais Notation(4 Axis Notation)
Euler(p1Fp2) 90.0 24.627 30.0
Material select
Magnesium.TXT
c/a 1.625 ψ 2 □ ▼ Calc
DISP
Position 10 Disp size 200 Disp BG Corr Black Line size 1.0 MINUS
OK Return Structure

CrystalOrientationソフトウエア

🕅 CrystalOrientationDisp 2.04YT[15/10/31] by CTR
File Help Symmetry Special Index
Material Material Cubic 1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0
(hkl)[uvw] 7 26 27 26 -7 0 Calc
Euler Angle
(p1 P p2) <=90 0.0 44.9212 15.0685 Calc
Present Condition Euler Angle 0.0 45.0 15.0
Double Miller Indices 0.183 0.683 0.7071 0.9659 -0.2588 0.0
DISP
Position10Isp size400DISPBG colorBlackLine size2.0Minus
OK Return Structure

 Euler角度から {hkl} <uvw>の計算 Hexagonal

$$\begin{bmatrix} h\\k\\i\\l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\0 & 1 & 0\\-\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\0 & 0 & c/a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sin\phi_2 \sin\phi\\\cos\phi_2 \sin\phi\\\cos\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u\\v\\t\\w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0\\0 & \frac{2}{3} & 0\\-\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0\\0 & 0 & a/c^{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\phi_1 \cos\phi_2 - \sin\phi_1 \sin\phi_2 \cos\phi\\-\cos\phi_1 \sin\phi_2 - \sin\phi_1 \cos\phi_2 \cos\phi\\\sin\phi_1 \sin\phi \end{bmatrix}_{a}$$

3. LaboTexExportデータ



B-tуре



B t y p e $(\phi 2) = A$ t y p e $(\phi 2) + 30$

3.1 A-typeデータをGPODFDisplayで読み込み

予め、材料を選択(Magnesium)

🜃 GI	ODFDisplay 1.12T	[15/1	0/31] b	у СТР
File	MagnesiumDISP	View	Help	
	30DF			
	ALLODF		_	
	Hexagonal			
	CrystalOrientat	ion		

LaboTexのATypeでExportされたA-Typewp選択

GPODFDisplay 1.12T[15/10/31] by CTR		
File MagnesiumDISP View Help		
LaboTex ODF Export (PHI1 PHI2 PHI ODF)	(Hexa: AType) or Other	
TexTools ODF Export	(Неха: ВТуре)	
StandardODF (ODF15)		
NewODF(f1 F f2 Value)		
popLA (Hexa: AType)		
DhmsBunge (*.EOD)		
Exit		

選択されたODF図が表示される



最大方位密度が表示されている ϕ 2 断面 2 5 度をマウスセンタボタンをクリック

最大方位密度位置をマウス左ボタンクリック



4指数計算された結果が表示される。

最大位置あたりをマウス右クリックで



このEuler角度位置の結晶方位を調べる場合、

ODF図画面を全体表示に戻し、CrystalOrientationを選択

M GPODFDisplay 1.12T[15/10/31] by CTR
File MagnesiumDISP View Help
30DF
ALLODF
Hexagonal
CrystalOrientation
🕾 HexaConvert 1.08YT[15/10/31] by CTR
File Step Help
A I⊽ X-Axis[100] ([2-1-10])
Miller Notation (3Axis Notation) Image: Second s
Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) 9 12 21 16 19 -26 7 18 hkii uvxxv
Euler(p1Fp2)
Material select
Magnesium.TXT
c/a 1.625 ψ2 □ ▼ Calc
DISP
Position 10 Disp size 200 DISP
BG Corr Black I Line size 1.0 MINUS
OK Return Structure

Euler角度を入力、Calcで(hkl)[uvw]が計算される。

しかし、正数化された(hkl)[uvw]と Euler 角度が異なるため、(hkl)[uvw]から Euler 角度を計算する。

🕌 HexaConvert 1.08YT[1	5/10/31] by CTR	
File Step Help		
A ☑ X-Axis[100] ((2-1-10) 🕂 . B 🗆 X-Axis[210] ((10-10)) 🕂	
Miller Notation @Axis Notati	ion)	uvw
Miller Bravais Notation(4 Axis	s Notation) 16 • 19 • -26 • 7 18 • hkil	uvxw
Euler (p1 Fp2)	0.37 64.954 25.28	
⊢ Material select—		
Magnesium.T>	xt 🔍	
c/a	1.625 ψ2 0 Calc	
DISP		
Position 10	Disp size 200 V DISP	
BG Corr Blac	ck Line size 1.0 MINUS	;
	OK Return Structure	

Dispで、結晶方位図が描画される事を確認してから、ReturnStructureを行います。



 $Euler角度から計算された {hkl} < uvw > が表示される。$

3. 2 B-typeを選択した場合

 ϕ 2断面を考えると BType=AType+30である。



↓ 2 断面55度にて、最大方位密度あたりをマウス右クリック



CrystalOrientationにて(40,65,55)を入力し

B HexaConvert 1.08YT[15/10/31] by CTR □ □ ■
File Step Help
A □ X-Axis[100] ([2-1-10])
Miller Notation (3Axis Notation)
Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) 9 9 12 9 -21 16 9 19 9 -26 7 18 hkil uvxw
Euler(p1Fp2) 40.37 64.954 55.29
- Material select
Magnesium.TXT
c/a 1.625 ψ2 0 ▼ Calc
[DISP
Position 10 Image: Disp size 200 Disp Disp BG Corr Black Image: Line size 1.0 MINUS
OK Return Structure

{hkl} <uvw>を決定して、Disp、Returnにて



結晶方位と方位位置を描画します。

4. (001)[uv0] (Φ=0.0)の場合、φ1+φ2が計算され、単独にφ1、φ2は計算されません。
 計算すると、Euler 角度が赤色に変わります。

HexaConvert 1.08YT[15/10/31] by CTR File Step Help	
A F X-Axis[100] ([2-1-10]) → B F X-Axis[210] ([10-10]) →	
Miller Notation (3Axis Notation)	uvw
	uvxw
Euler(p1Fp2) Image:	
Material select Magnesium.TXT	
c/a 1.625 ψ2 0 ▼ Calc	
Position 10 V Disp size 200 V DISP BG Corr Black V Line size 1.0 V MINUS	
HexaConvert 1.08YT[15/10/31] by GTR	
A 🔽 X-Axis[100] ([2-1-10])	
Miller Notation (3Axis Notation) Image: Comparison of the state	uvw
Euler(p1Fp2) O <t< td=""><td>UVXW</td></t<>	UVXW
Material select	
c/a 1.625 ψ 2 0 ▼ Calc	
DISP Position 10 BG Corr Black Line size	
OK Return Structure	
Fai2部分を適当に選択してください。 psi=2	0を選択
Euler(p1Fp2) Image: The second sec	

•

Calc

Magnesium.TXT

c/a 1.625 ψ2 20 🔽

5. ODF図のステップ間隔が5. 0以外の場合



選択すると、faiのデータが変更されます。