

結晶系によって表示方法が異なる

逆極点図の表示方法

2016年10月16日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

目次

1. 概要

1. 1 使用しているソフトウェア

2. θ/θ -scan の例

3. ODF 解析後の逆極点図

3. 1 C u b i c

3. 2 H e x a g o n a l を等高線描画(InverseDisplay ソフトウェア)

3. 3 H e x a g o n a l (チタン)

3. 4 H e x a g o n a l を等高線描画(InverseDisplay ソフトウェア)

3. 5 T e t r a g o n a l (Nd₂Fe₁₄B)

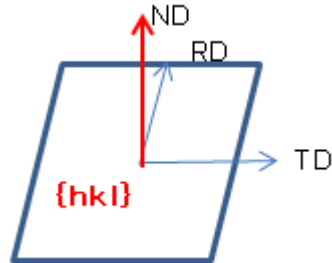
3. 6 O r t h o r o m b i c (PE)

3. 7 M o n o c l i n i c (P o l y p r o p y l e n e)

1. 概要

結晶方位に関して、極点図、逆極点図、ODF図などがあり、逆極点図表示では方位(Direction)と回折面(Plane)の2種類あります。

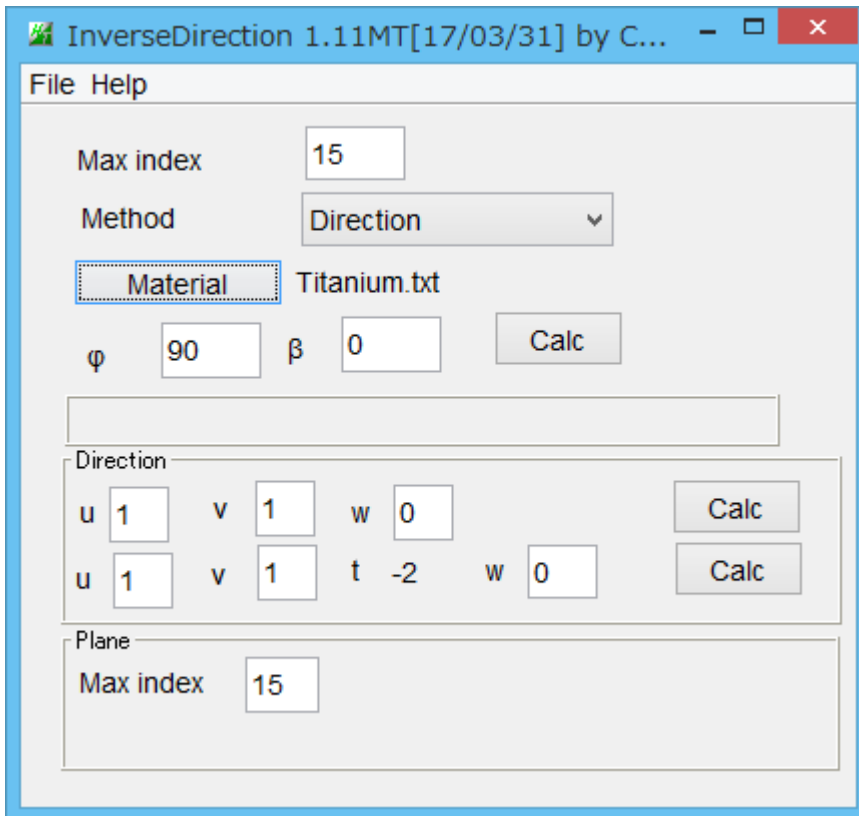
Direction表示は、ODF解析後の逆極点図であるが、ODF解析後もPlane表示するケースもあります。Plane表示はプロファイル(θ/θ -scan)測定による random 試料との比で表示しているソフトウェアもあります。この場合、Cubic、Hexagonal に対応



Directionは、ND方向、Planeは{hkl}面である。

このDirectionとPlaneはCubicでは一致するが、Cubic以外は一致しないケースもあります。

逆極点図のDirection \leftrightarrow Plane変換計算ソフトウェアとして、InverseDirectionソフトウェアがあります。Cubic、Hexagonal、Orthorhombic、Tetragonalに対応しています。



ODF解析はTexToolsで逆極点図を作成、ND、TD、RDの計算が行えるが、主にND方向を記載

1. 1 使用しているソフトウェア

極点図作成

L a b o T e x

ODF解析し逆極点図作成

T e x T o o l s

T e x T o o l s 逆極点データをTXT2変換

M a k e P o l e F i l e

D i r e c t i o n < - > P l a n e 変換確認

I n v e r s e D i r e c t i o n

θ/θ 測定データから逆極点図表示

P r o f i l e t o D i v i s i o n P r o f i l e

I n v e r s e A l l

逆極点図表示

G P I n v e r s e D i s p l a y

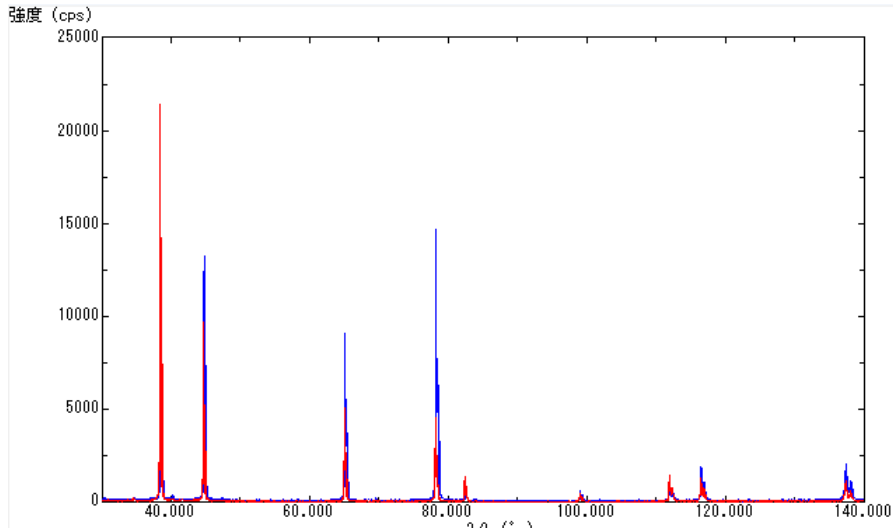
(I n v e r s e C o u n t e r D i s p l a y)

(I n v e r s e C u b i c C o n t o u r D i s p l a y)

ODFソフトウェア (L a b o T e x, T e x T o o l s) 以外、CTRソフトウェアに含まれます。

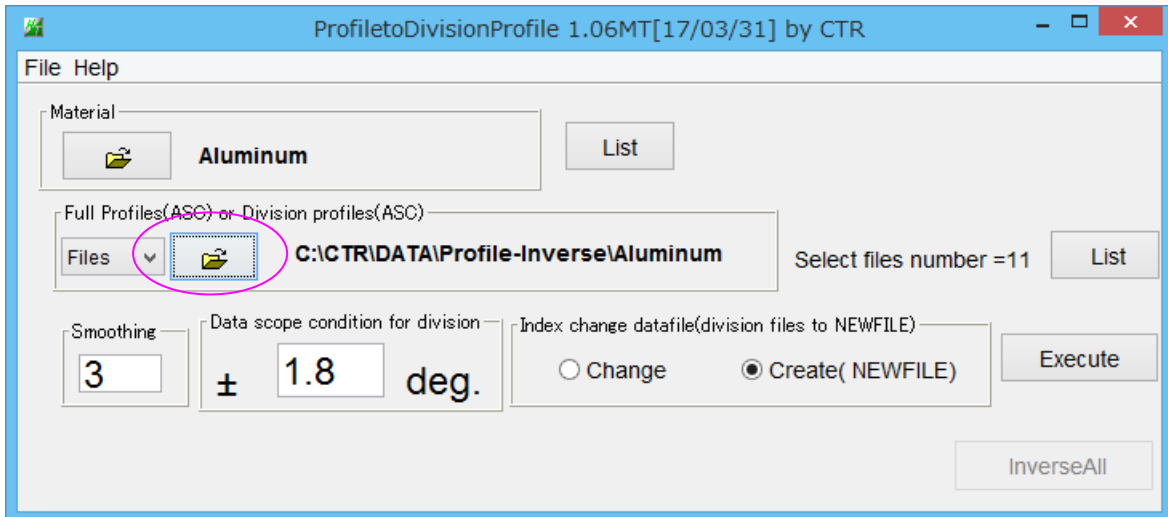
2. θ/θ -scan の例

アルミニウムの粉末 (赤) と H 材 (青) の回折プロファイル

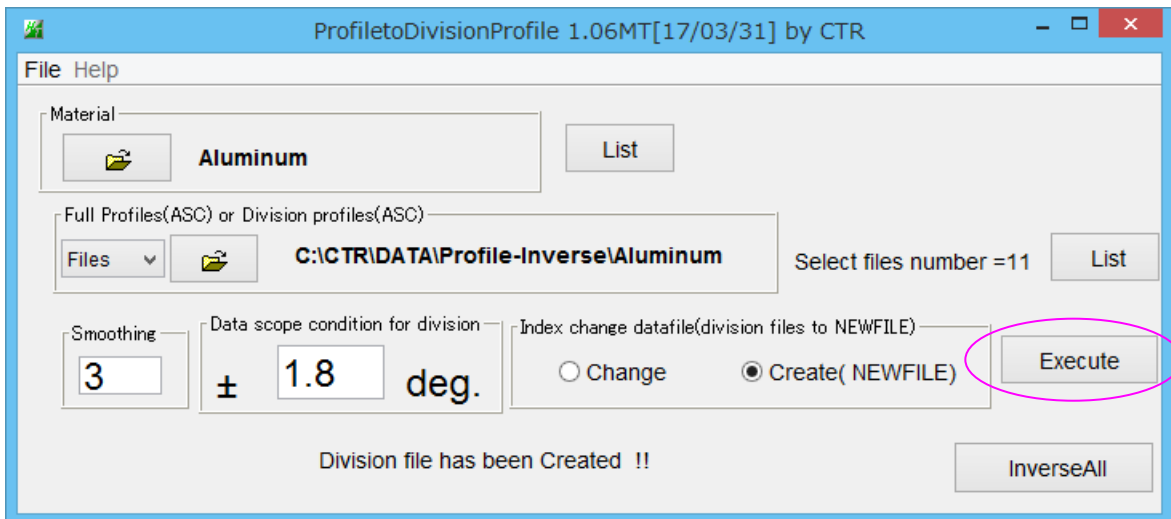


連続回折プロファイルから反射毎の分割プロファイルに変換し、強度比を計算し逆極点図に表示する。

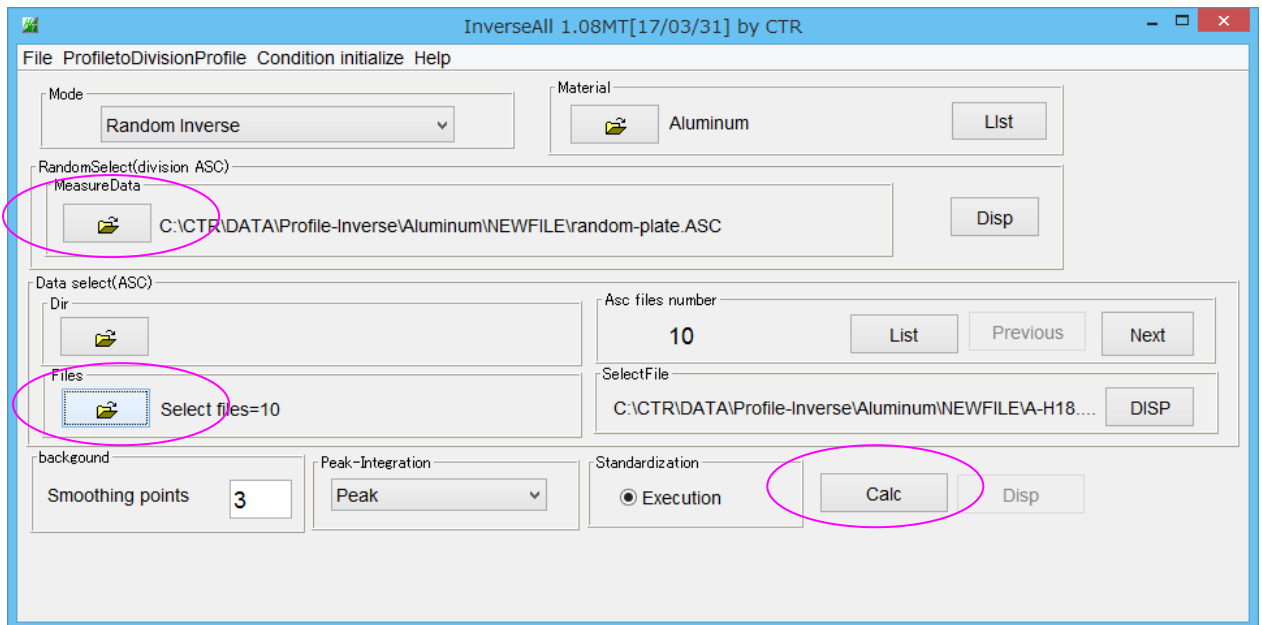
連続プロファイルから分割プロファイルに変換



同一ホルダにある複数の連続プロファイルを一括変換します。(11プロファイルを選択しています)



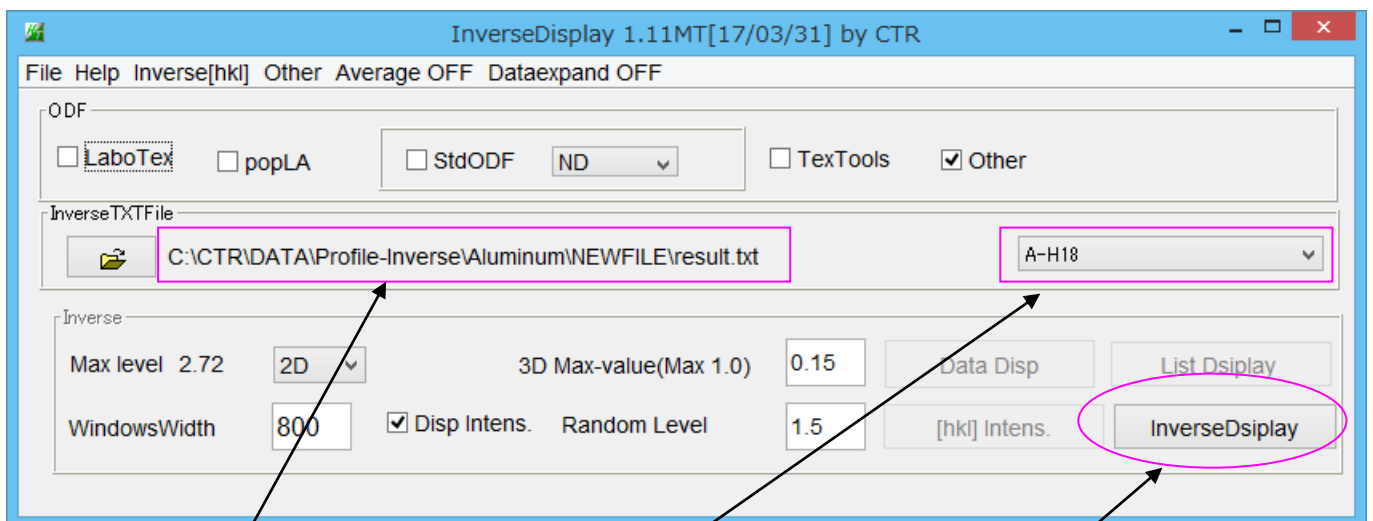
変換が終了したら、InverseAll に移ります。



Random ファイルと被検ファイルを指定し、分割ファイルの面積を計算し、random との比率を計算

	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
A-H18	0.475	1.137	1.529	2.72	0.335	1.148	0.582	1.132	1.632
A-T4	0.322	2.984	0.433	0.739	0.202	5.02	0.547	1.104	0.189
Al-powder	1.016	1.005	0.967	0.961	0.957	0.989	1.02	0.974	0.995
B-H18	0.63	1.102	2.016	1.486	0.427	0.874	1.146	0.972	1.237
B-O	0.456	2.427	0.555	0.924	0.558	4.253	0.675	1.006	1.045
C-Bach	0.103	2.703	1.478	1.064	0.06	4.301	0.689	1.052	1.238
C-CAL	0.464	2.538	0.9	0.664	0.463	2.937	0.532	0.757	0.511
D-H14	0.193	1.534	1.602	3.192	0.117	1.919	0.462	1.442	1.027
D-H18	0.178	0.766	2.585	3.893	0.097	0.635	0.394	1.091	1.787
D-O	0.013	3.437	0.654	0.902	0.037	6.533	0.29	0.892	0.806

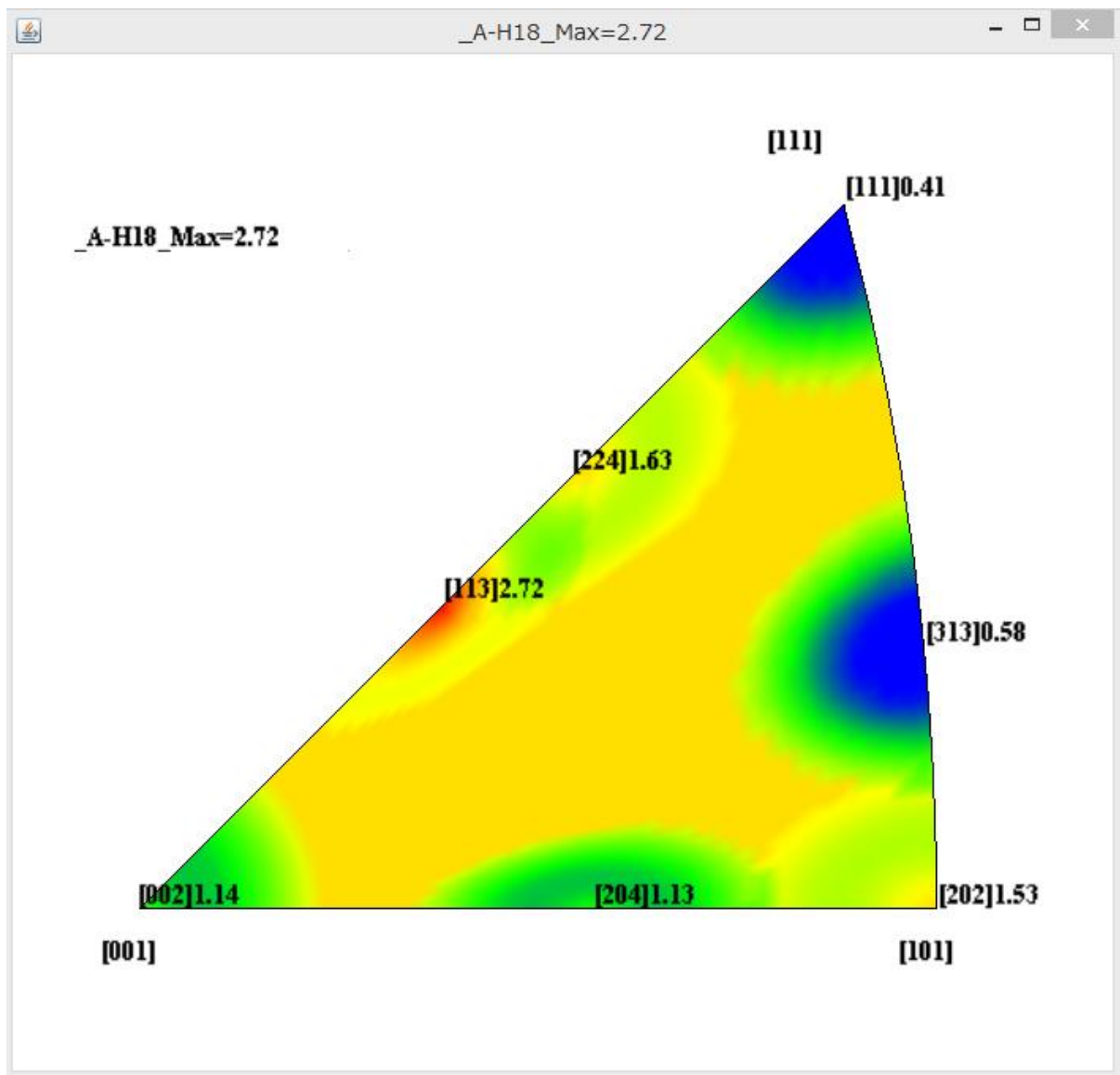
この計算結果から逆極点図を InverseDisp で表示します。



計算結果ファイル

逆極点表示を選択

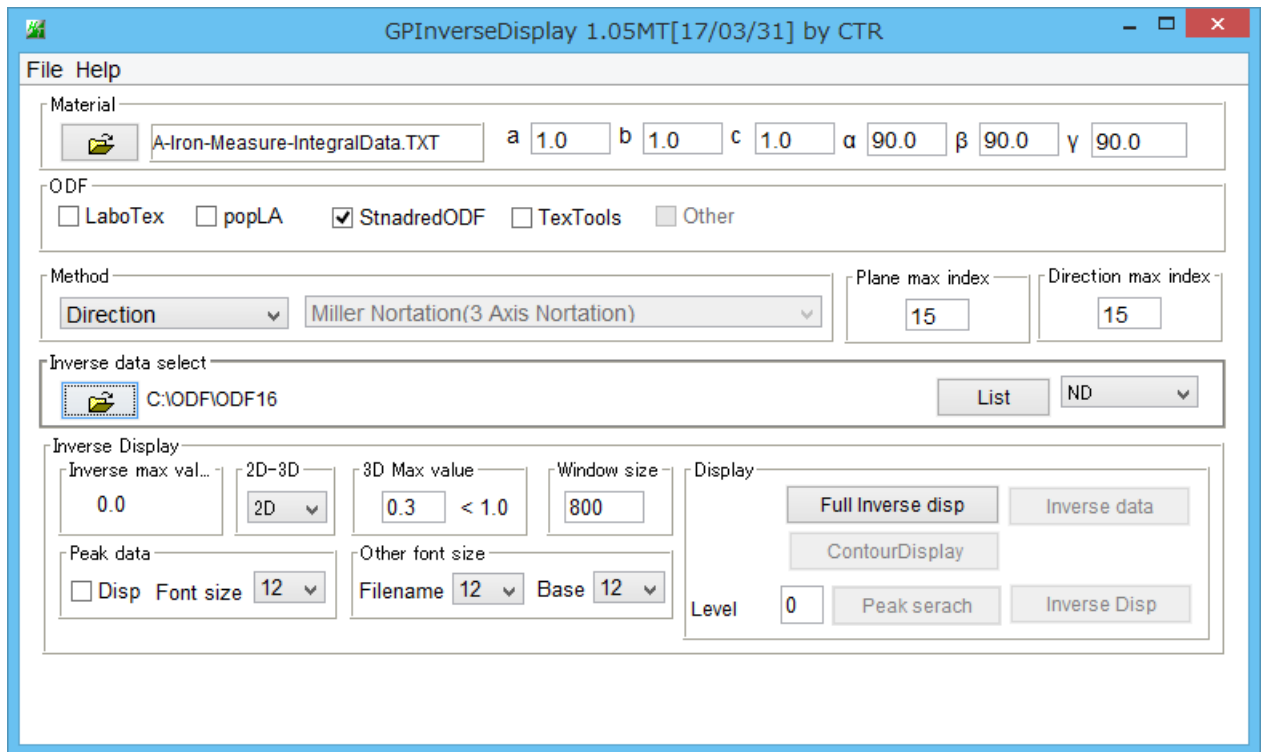
逆極点図の表示



表示は、Direction で行われているが、Cubic では Plane と同一である。
InverseDisplay は Cubic に限ります。Cubic 以外は GPIInverseDisplay で行います。

3. ODF 解析後の逆極点図

Cubic,Hexagonal,Orthorombic,Tetragonal に関しては、GPIInverseDisplay で対応



各種 ODF 解析データの表示を同一表示で比較できます。

Cubic,Hexagonal,tetragona,Orthrombic に対応

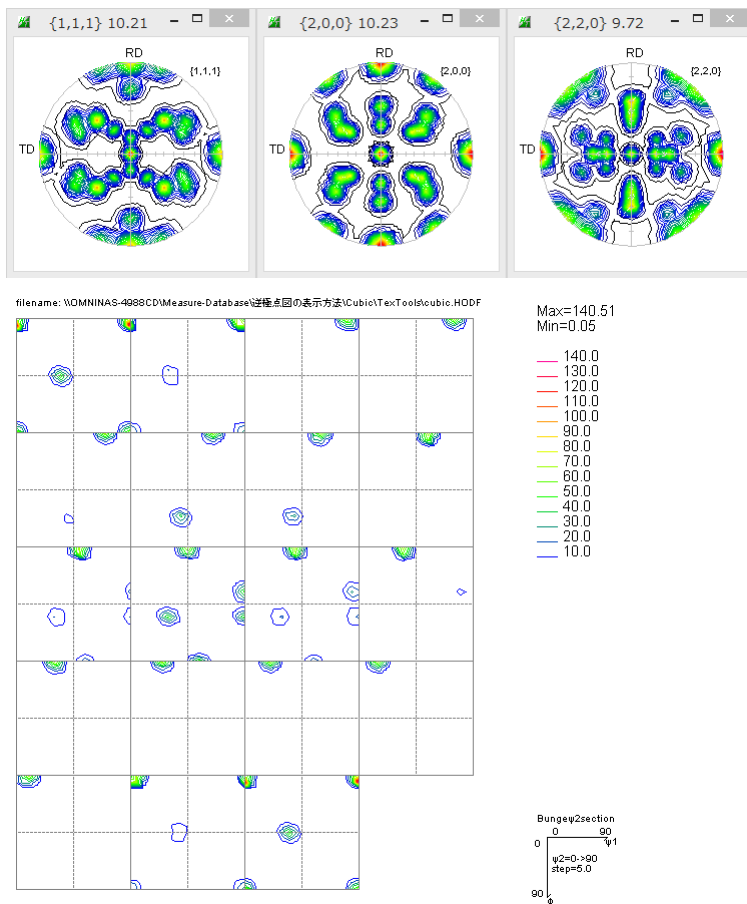
逆極点表示を Direction<->Plane 変換

逆極点図の 2D,3D,等高線表示

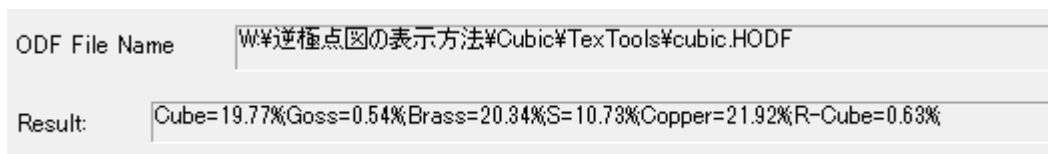
2 D, 3 D 表示では極位置のピークサーチと指数付け

等高線表示ではマウス位置のリアルタイム方位計算

3. 1 Cubic

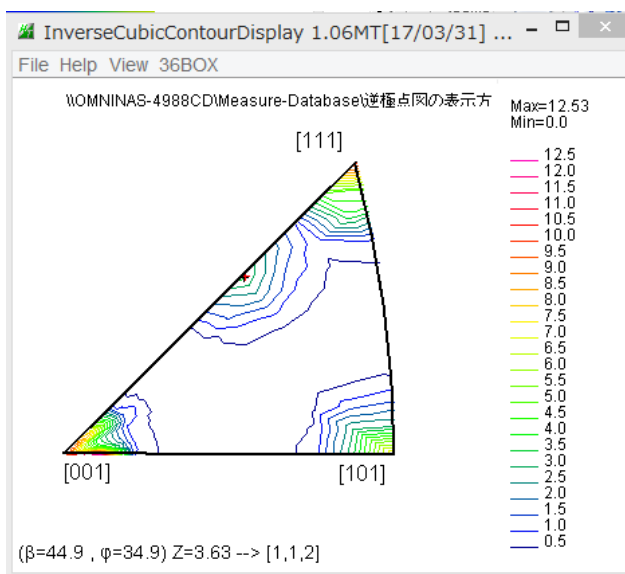


VolumeFraction

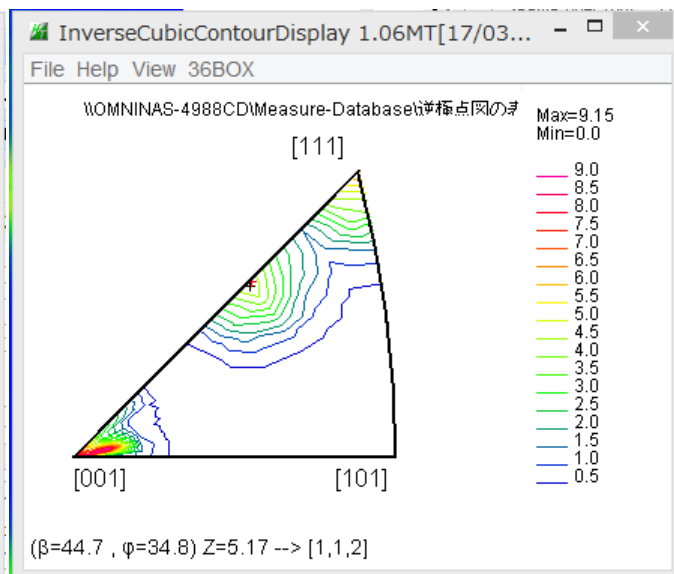


逆極点図

ND

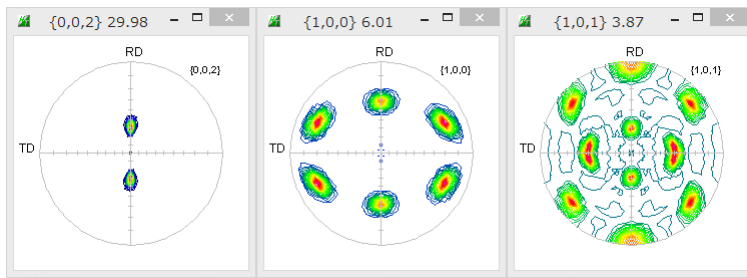


RD



[001],[101],[111]以外に[112]が検出されています。

3. 3 Hexagonal (チタンの場合)



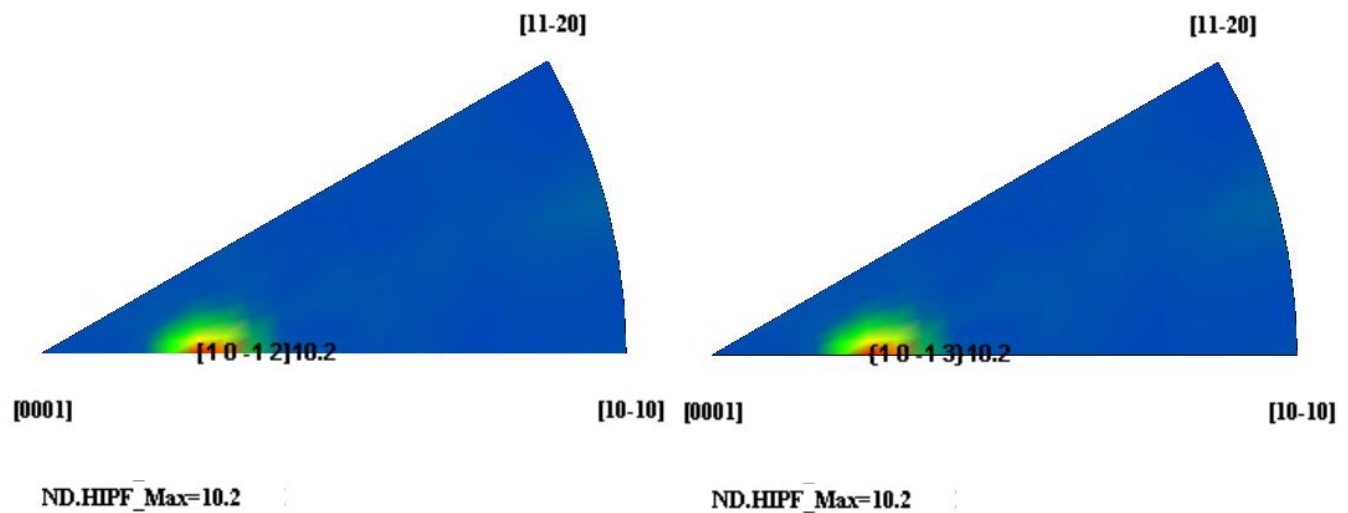
逆極点図 (ND を表示)

六方晶の逆極点表示では、3 指数 <-> 4 指数表示, Direction <-> Plane 表示があります。

計算最大ミラー指数を 7 とした場合

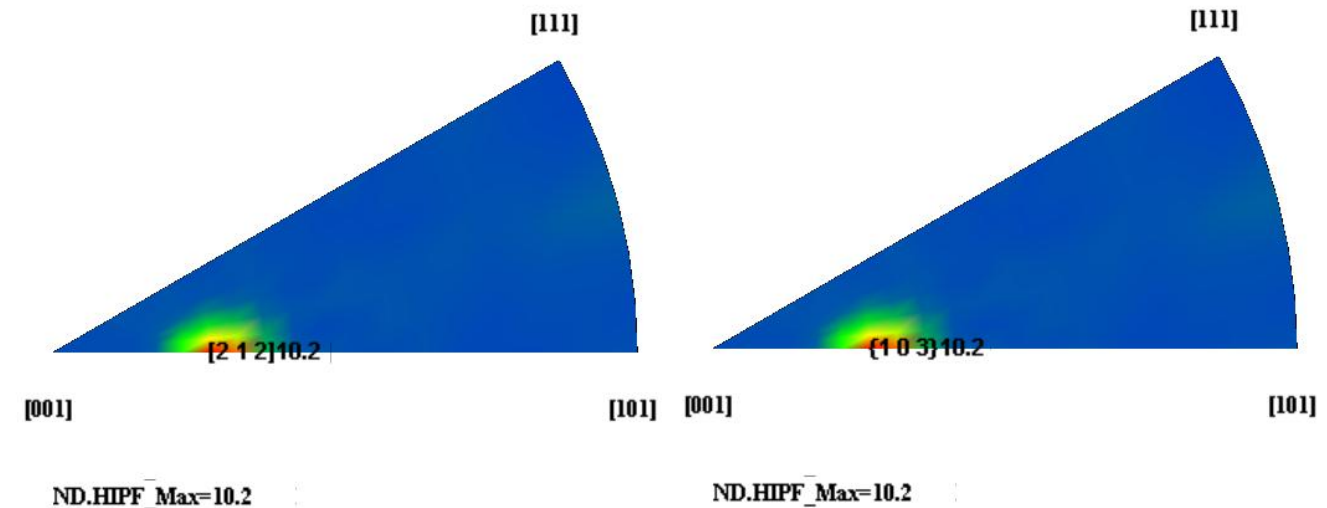
Method: Miller-Bravais Notation(4 Axis Nortation) Plane max index Direction max index

Method: Miller-Bravais Notation(4 Axis Nortation) Miller-Bravais Notation(4 Axis Nortation)

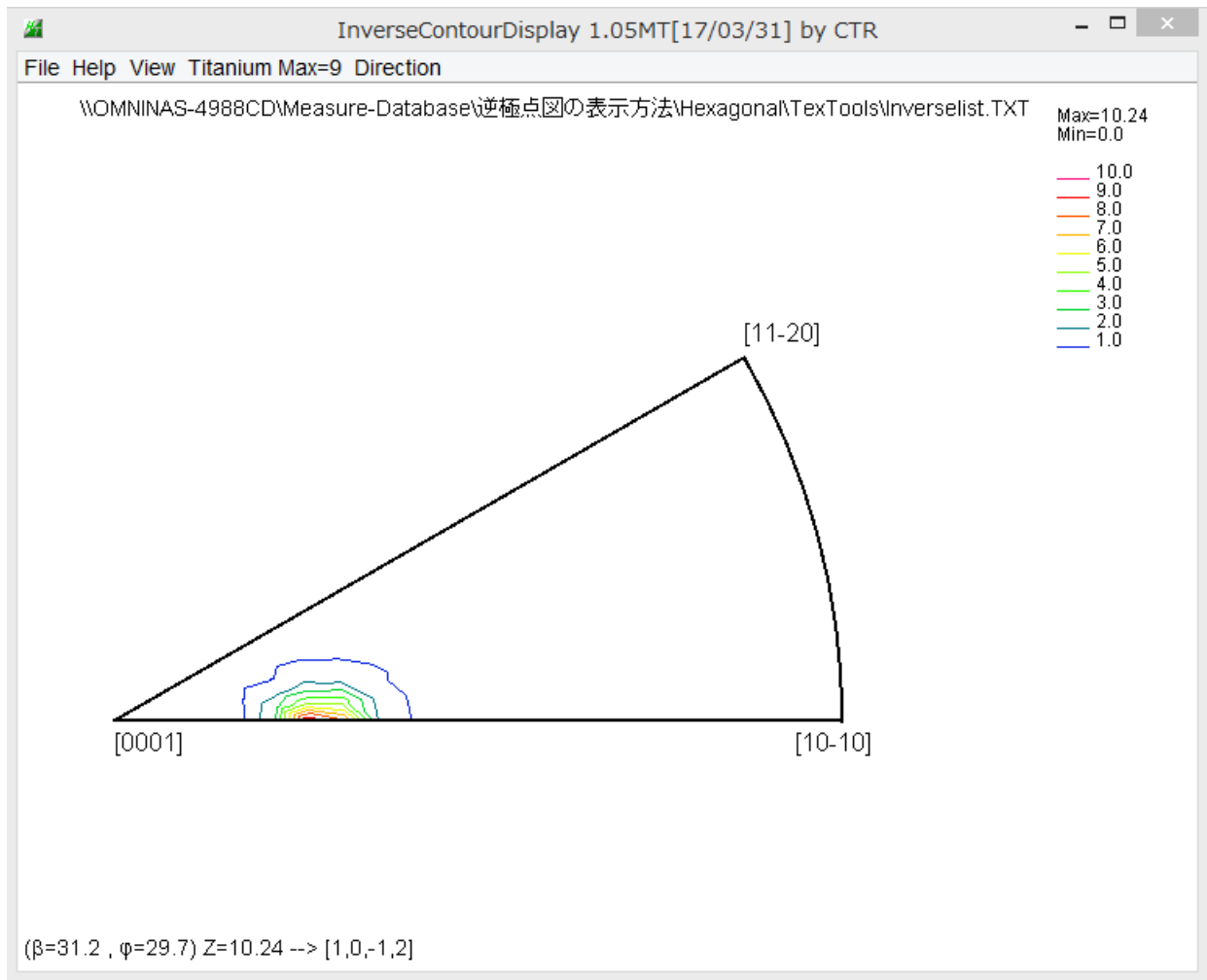


Method: Miller Nortation(3 Axis Nortation)

Method: Miller Nortation(3 Axis Nortation)

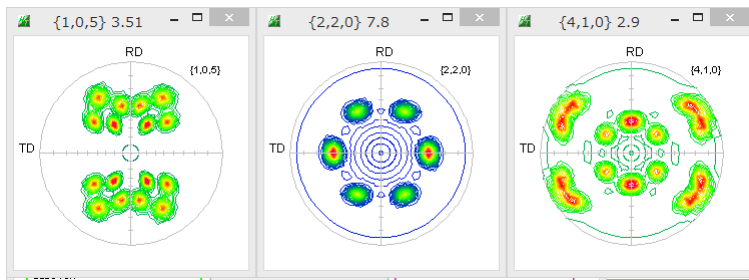


3. 4 Hexagonal を等高線描画(InverseDisplay ソフトウェア)



InverseDisplay ソフトウェアは、TXT データを読み込み、指定された格子定数から指数変換します。Hexagonal では、4 指数で表示しています。

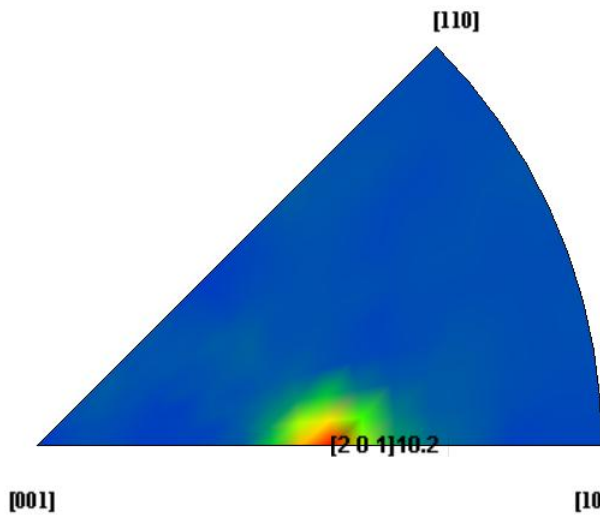
3. 5 Tetragonal (Nd₂Fe₁₄B)



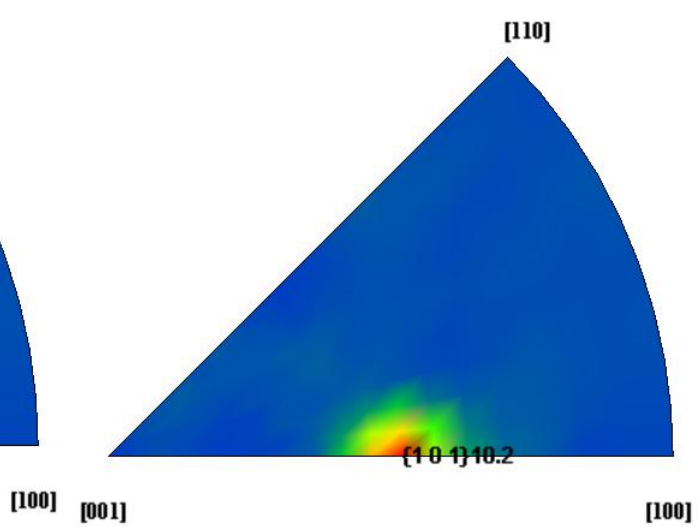
逆極点図 (ND を最大指数 7 で計算)

Method

Method

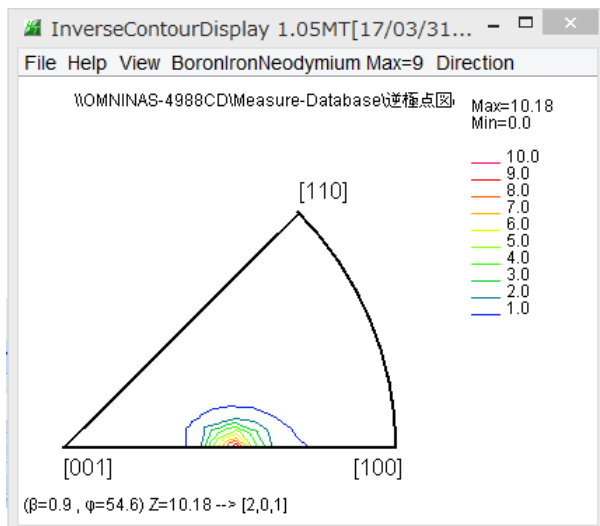


ND.HIPF_Max=10.2

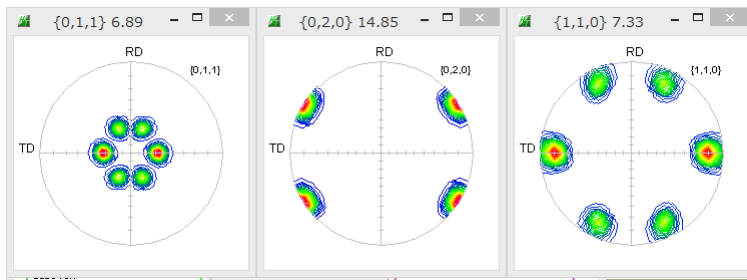


ND.HIPF_Max=10.2

等高線表示は Direction 表示



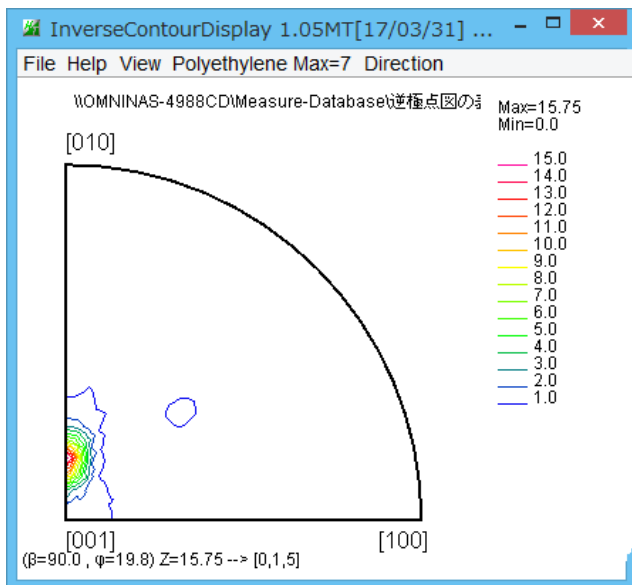
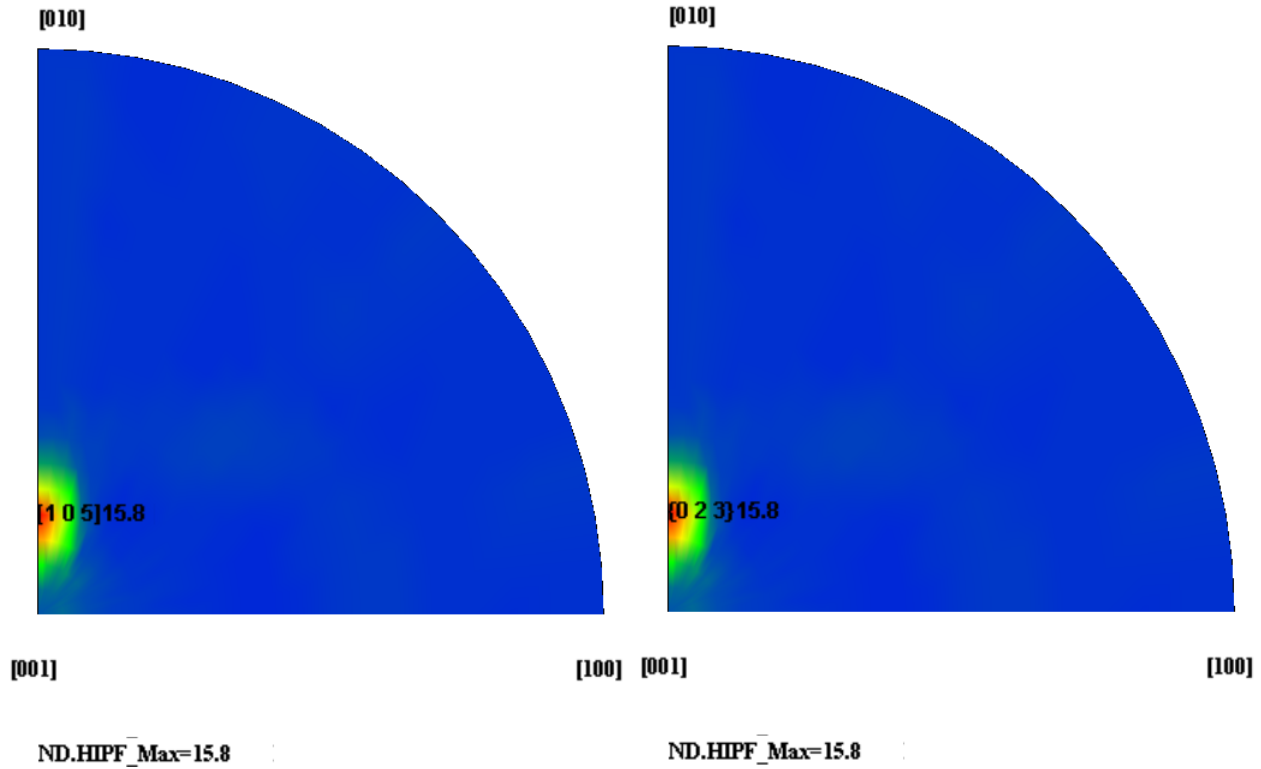
3. 6 Orthorhombic (PE)



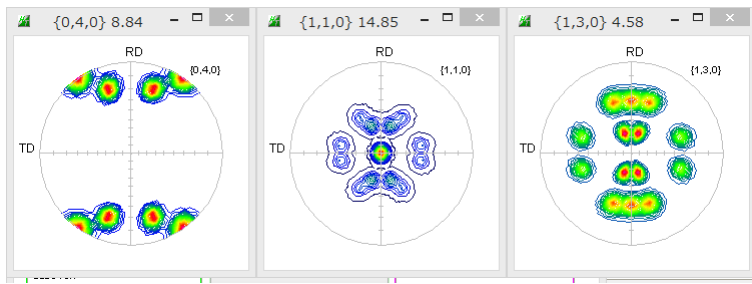
逆極点図(NDを最大指数5で表示)

Direction

Plane



3. 7 Monoclinic (Polypropylene)



逆極点図

