

## 結晶方位と逆極点図で方位にずれがある

結晶方位  $\{h k l\} \langle u v w \rangle$  に対し、RD逆極点図の最大位置が  $\langle u v w \rangle$  と一致しない事が発生したため、詳細に調査しました。

前回、「チタン合金の主要方位をシュミレーション」にて  $\{0 1 - 1 4\} \langle 0 - 2 2 1 \rangle$  のRD逆極点図方位位置にずれが発生しています。

2019年10月22日

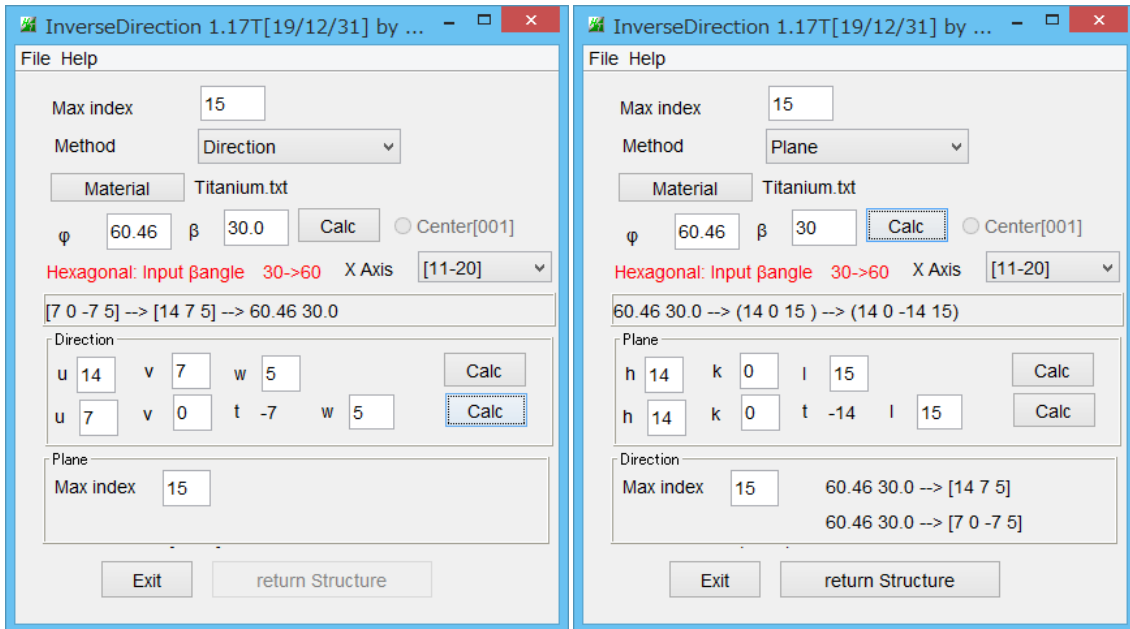
*HelperTex Office*

## 概要

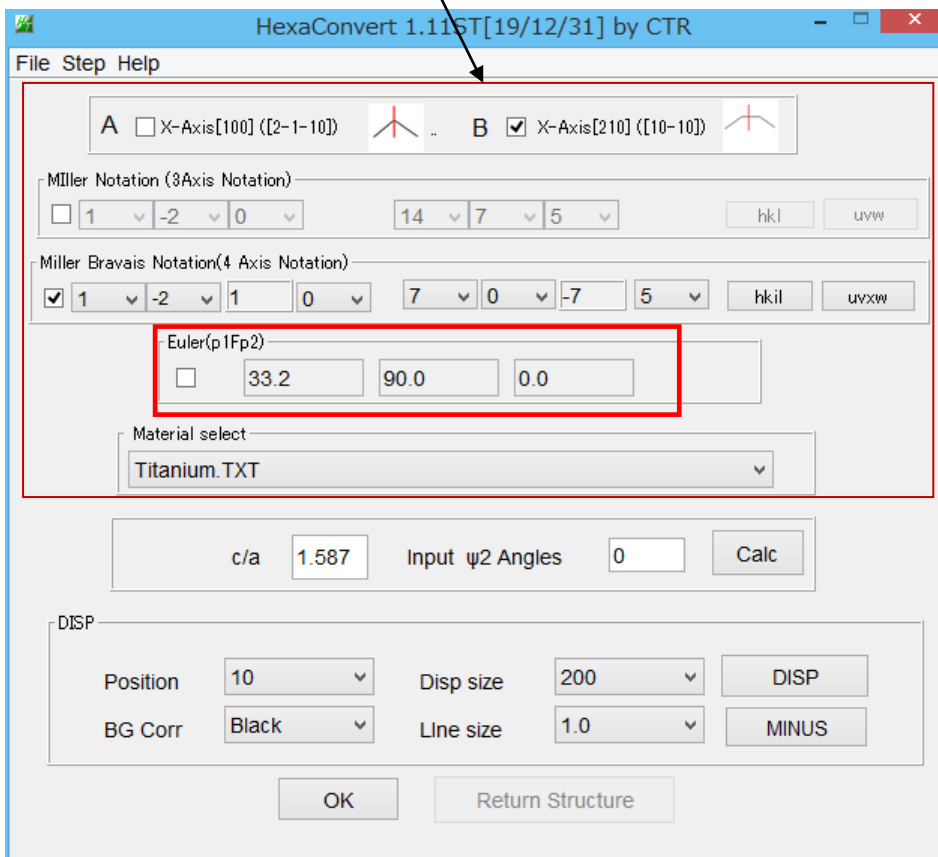
結晶方位が  $\{hkl\} \langle uvw \rangle$  の場合、ND逆極点図の Plane 表示で  $\{hkl\}$  RD極点図の Direction 表示で  $\langle uvw \rangle$  と一致すると考えられますが、実際は微妙にずれています。シュミレーションで確認してみます。

## 例

逆極点図の交点上に最大値が存在するようにするため、



$\langle 70-75 \rangle$  であれば、 $(60.46, 30.0)$  となるので、1 deg 間隔の ODF 図から計算可能と考えられます。方位は



# ODF図作成

Model ODF

Crystal Symmetry:  $D_6$  (Hexagonal) | Sample Symmetry: Orthorhombic | Grid Cells for Output ODF: 1.0\*1.0 | Step: 0.50 | Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 1. 100.0% | Component No. 1. 100.0% | Component No. 1. 100.0%

FWHM  $\phi_1$  = 10.0 | FWHM  $\phi$  = 10.0 | FWHM  $\phi_2$  = 10.0

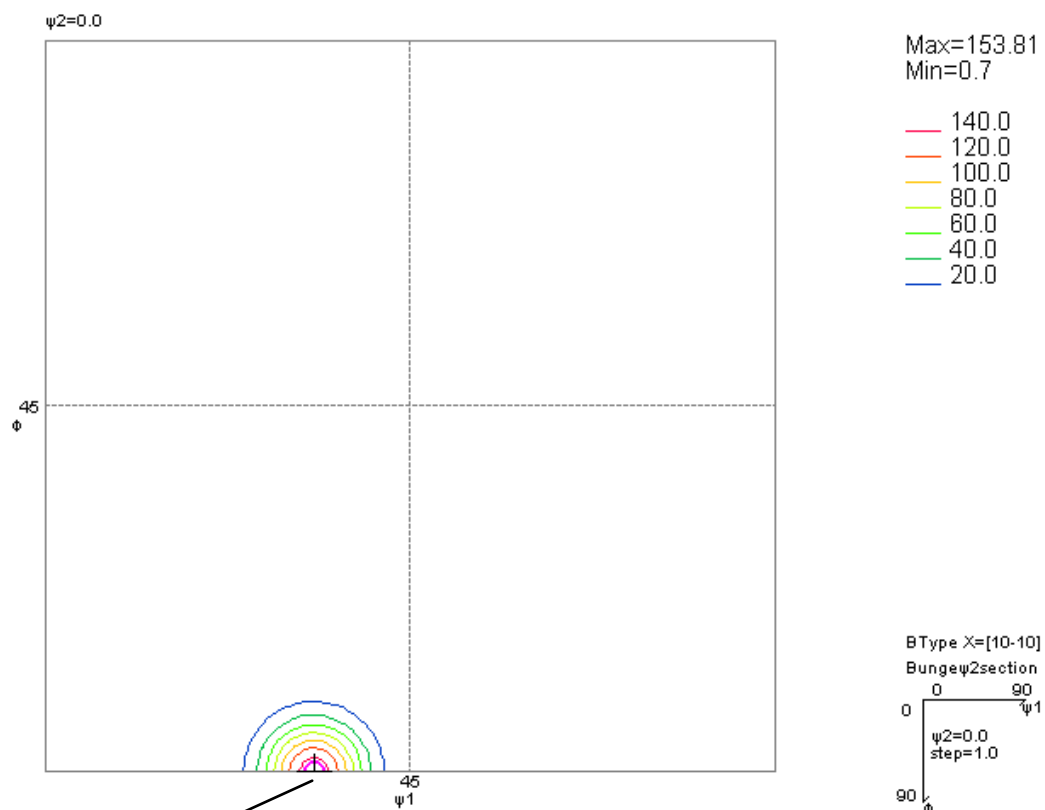
No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\phi$	FWHM $\phi_2$	Volume Fraction
1	{ 33.20, 90.00, 0.00 }	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	80
2	{ 54.74, 90.0, 45. } brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
3	{ 39.23, 65.91, 26.5 } copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
4	{ 0.0, 45., 0. } goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
5	{ 45., 90., 0. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
6	{ 35.26, 90., 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
7	{ 35.26, 90., 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0 扇形</td <td>10.0</td> <td>10</td>	10.0	10
8	{ 90., 54.74, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
9	{ 74.21, 45., 90. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
10	{ 15.23, 47.12, 68.20 }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10

Sample Name: 1-20-1475B | Project Name: Ti-B | Cell Parameters (Relative): a=1.0, b=1.0, c=1.587,  $\alpha=90.0$ ,  $\beta=90.0$ ,  $\gamma=120.0$

Max. Linearity:  | Background: 70 %

Creation of Model ODF | Exit

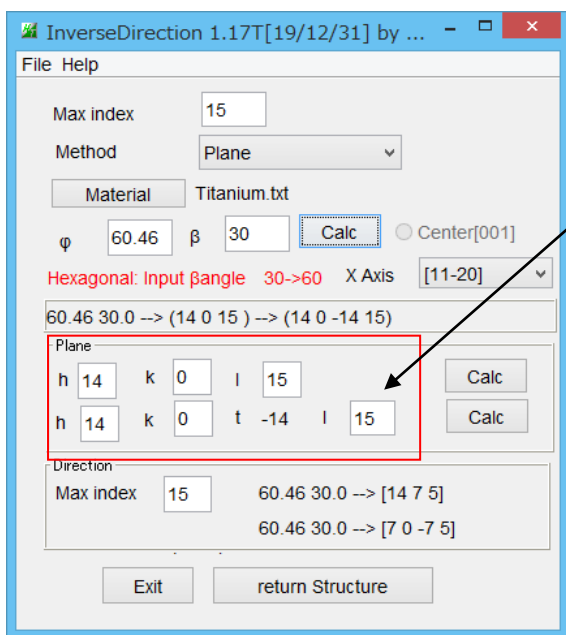
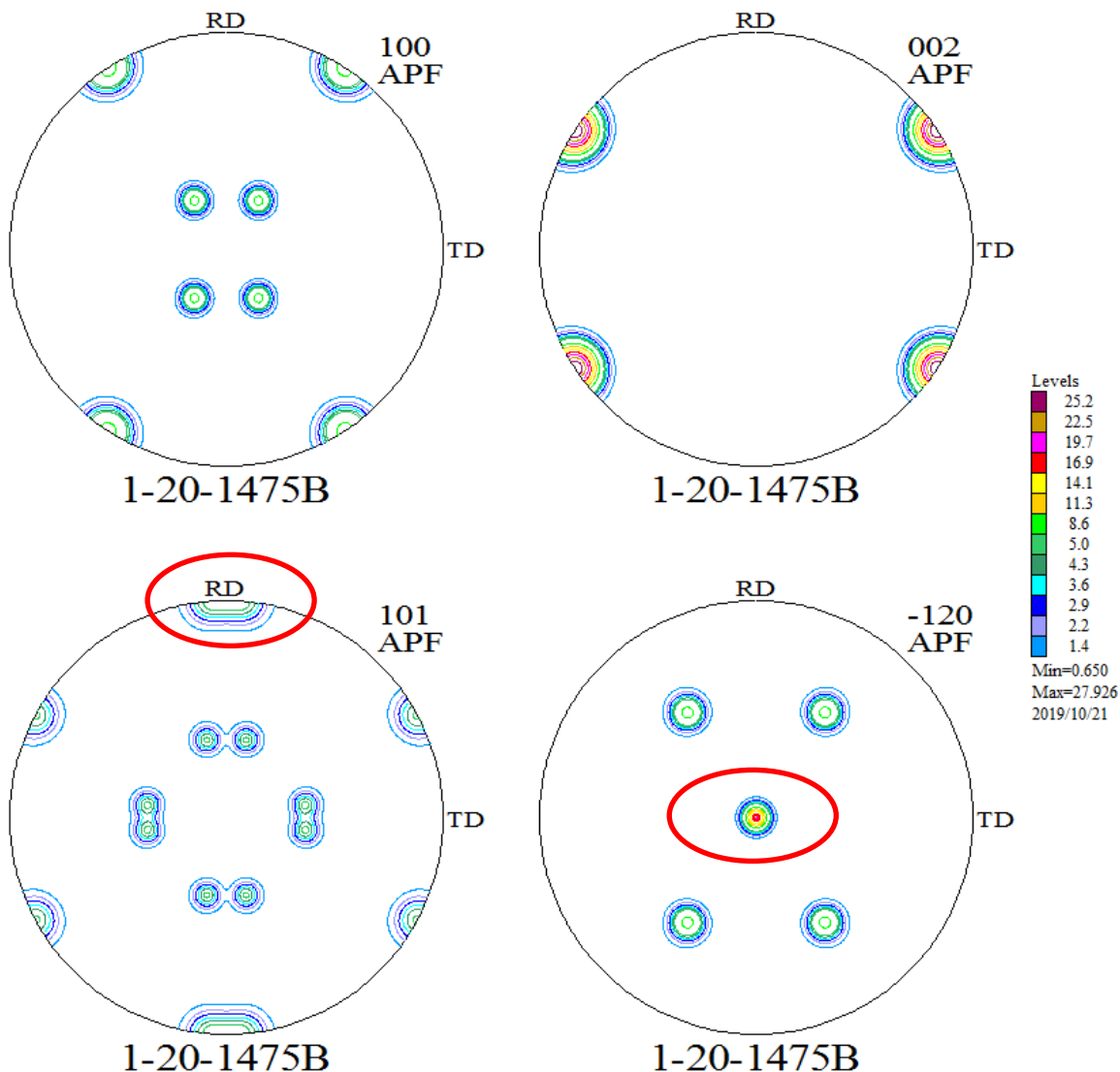
## 作成されたODF図



$(-1, 2, -1, 0)[7, 0, -7, 5]f_1=33.2, F=90.0, f_2=0.0$  ODF=153.81

19/10/21

極点図



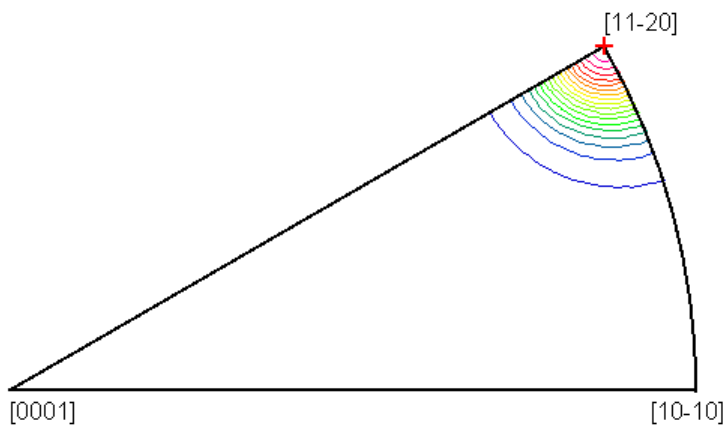
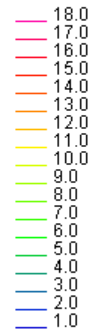
Direction [70-75] の Plane は (14 0 -14 15)であるが、最大指数9のため極点図表示できません。(101)極点図に近い

以上の事から  
 ND 逆極点図の Plane 表示で(-12-10)  
 RD 逆極点図の Direction 表示で[70-75]を期待する。

# 作成された逆極点図

U:\非対称逆極点図の評価\1-20-1475B\1-20-1475B.TPF  
ND

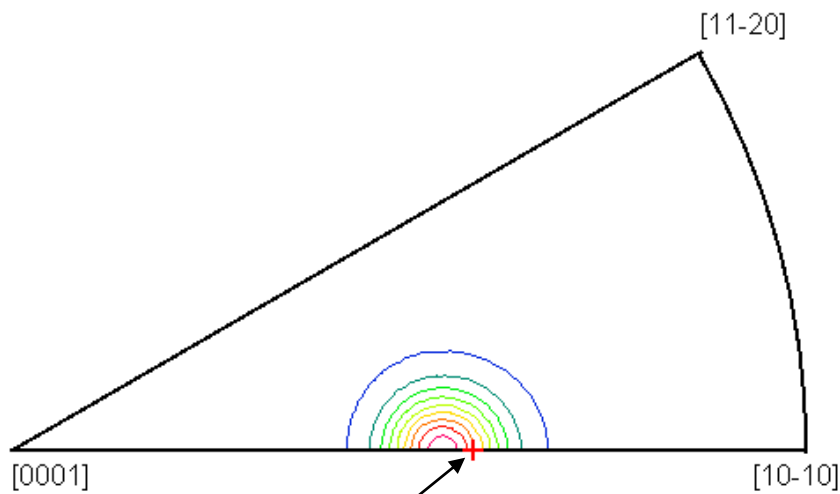
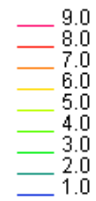
Max=18.87  
Min=0.0



(  $\phi=90.0$  ,  $\beta=60.0$  )  $Z=18.87 \rightarrow (1,1,-2,0)$

U:\非対称逆極点図の評価\1-20-1475B\1-20-1475B.TPF  
RD

Max=9.76  
Min=0.0



$\phi=60.36$  ,  $\beta=30.0$  )  $Z=7.56 \rightarrow [7,0,-7,5]$

RDがずれる。

実際のRD逆極点図最大角度

30.0	53.0	6.6800000000000001↓
30.0	54.0	7.93↓
30.0	55.0	8.91↓
30.0	56.0	9.53↓
30.0	57.0	9.76↓
30.0	58.0	9.4↓
30.0	59.0	8.69↓
30.0	60.0	7.5600000000000005↓
30.0	61.0	6.32↓

[2-1-10]← [10-10] →[11-20]

LaboTexのoutデータ

51.0	1.28	1.54	1.88	2.29	2.76	3.26	3.75	4.19	4.52	4.70	4.71	4.53	4.20	3.75
52.0	1.44	1.78	2.23	2.77	3.40	4.08	4.75	5.35	5.81	6.07	6.09	5.87	5.43	4.82
53.0	1.58	2.01	2.55	3.23	4.02	4.87	5.72	6.49	7.08	7.43	7.48	7.22	6.68	5.93
54.0	1.71	2.21	2.86	3.67	4.61	5.64	6.67	7.61	8.35	8.79	8.87	8.57	7.93	7.04
55.0	1.79	2.33	3.05	3.95	5.00	6.16	7.34	8.42	9.27	9.80	9.92	9.61	8.91	7.90
56.0	1.80	2.36	3.12	4.06	5.18	6.43	7.69	8.87	9.81	10.41	10.57	10.26	9.53	8.48
57.0	1.77	2.34	3.09	4.05	5.19	6.46	7.76	8.98	9.96	10.60	10.78	10.49	9.76	8.68
58.0	1.67	2.19	2.89	3.79	4.87	6.08	7.33	8.51	9.48	10.11	10.32	10.07	9.40	8.39
59.0	1.54	2.00	2.63	3.44	4.42	5.52	6.67	7.76	8.67	9.27	9.49	9.29	8.69	7.77
60.0	1.38	1.76	2.28	2.96	3.79	4.73	5.72	6.66	7.45	7.99	8.20	8.05	7.56	6.79
R1 0	1 99	1 59	1 95	2 49	2 18	2 99	4 79	5 51	6 17	6 69	6 91	6 71	6 99	5 70

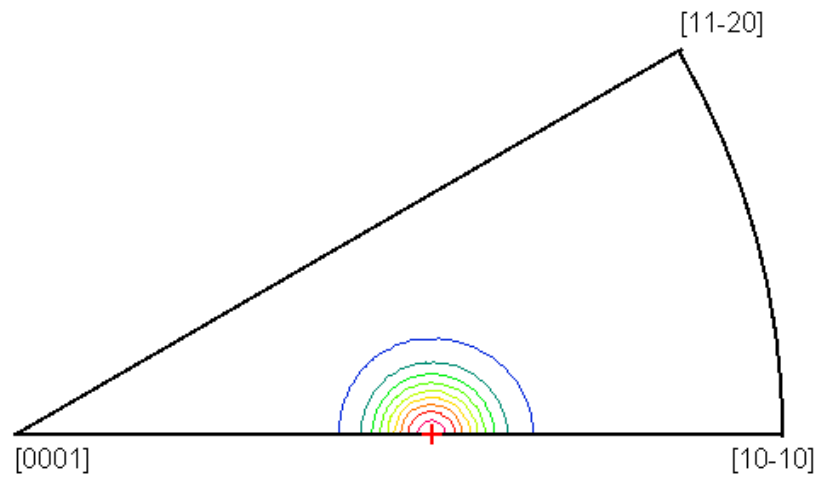
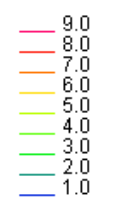
Average

[2-1-10] と [11-20] の平均

30deg

U:\非対称逆極点図の評価\1-20-1475B\1-20-1475B.TPF RD

Max=9.76  
Min=0.0



(φ=57.0, β=30.0) Z=9.76 --> (11,0,-11,13)

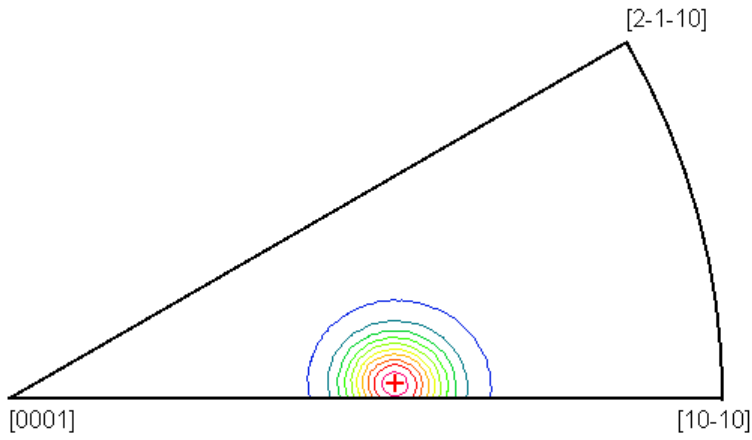
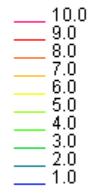
φ  β

ではない

[2-1-10]

U:\非対称逆極点図の評価\1-20-1475B\1-20-1475B.TPF  
RD

Max=10.78  
Min=0.0

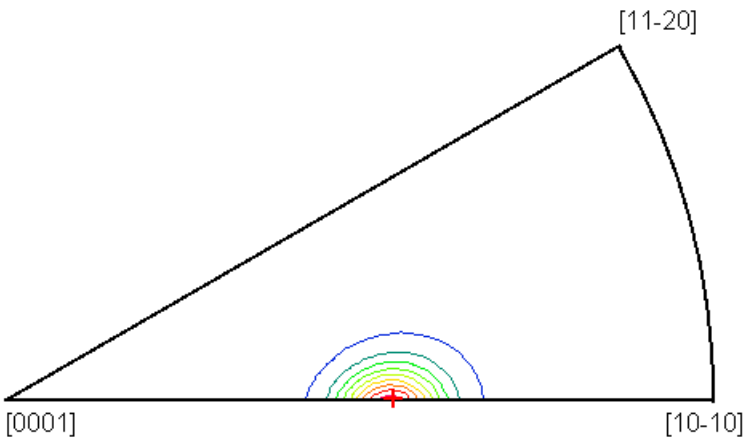


( $\phi=56.9$   $\beta=27.7$ )  $Z=10.78 \rightarrow (5,0,-5,6)$

[11-20]

U:\非対称逆極点図の評価\1-20-1475B\1-20-1475B.TPF  
RD

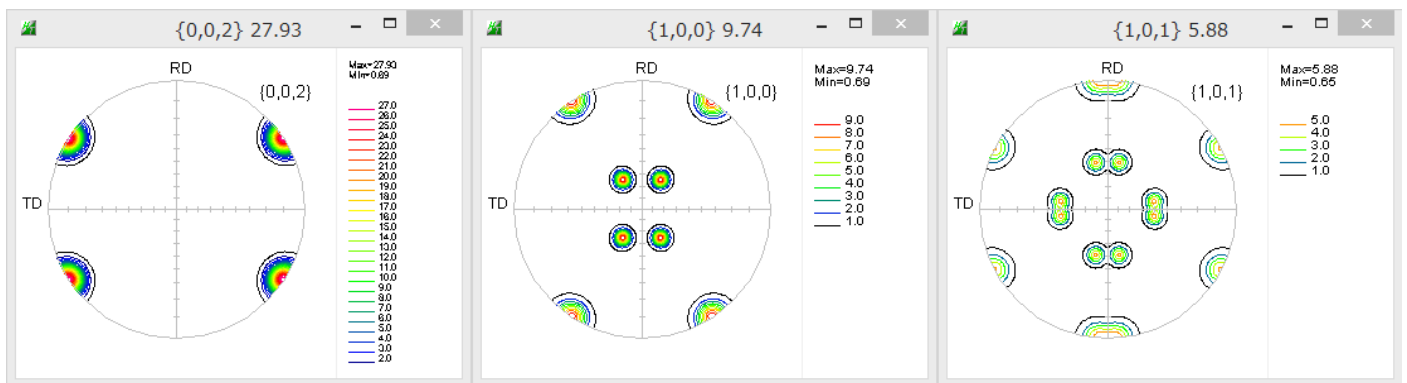
Max=9.76  
Min=0.0



( $\phi=57.4$   $\beta=30.3$ )  $Z=9.76 \rightarrow (6,0,-6,7)$

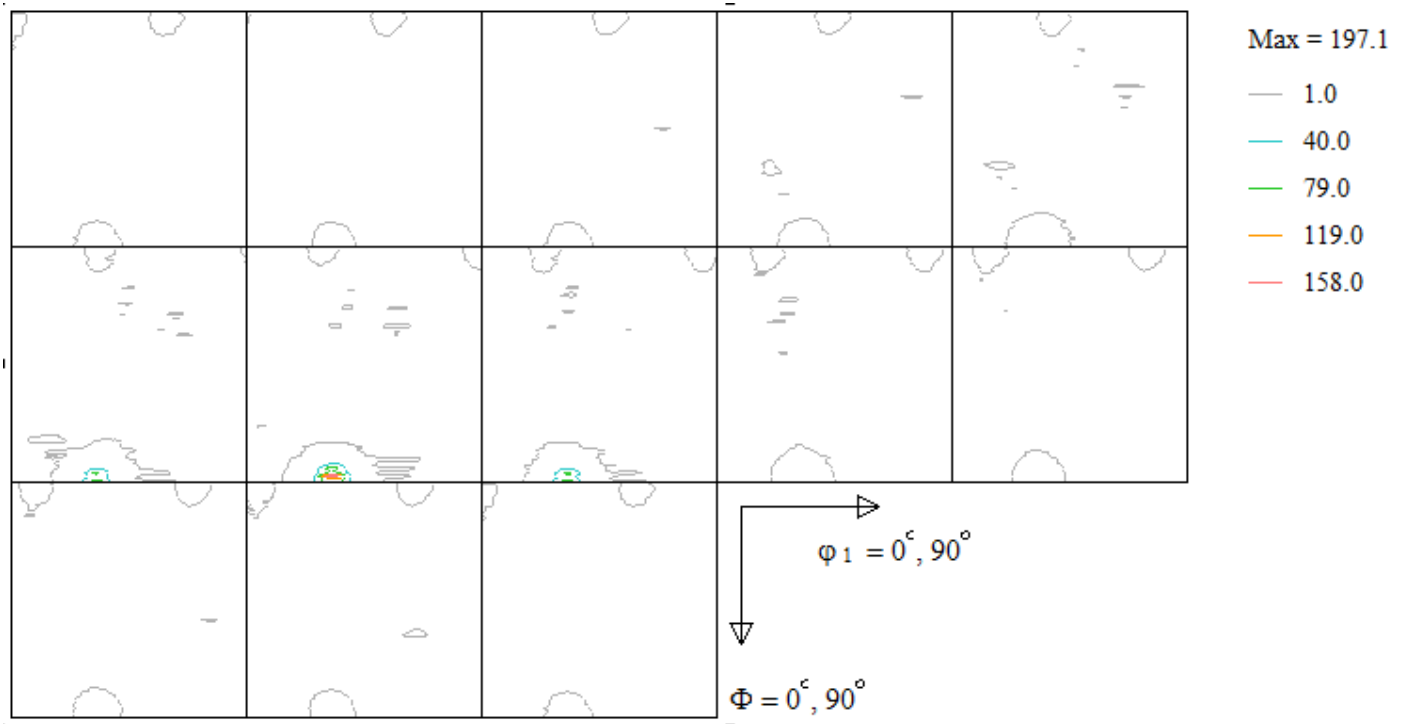
いずれの場合も   $\phi$    $\beta$  が最大値にならない

{100}, {002}, {101} 極点図をExportし他のODFで検証します。

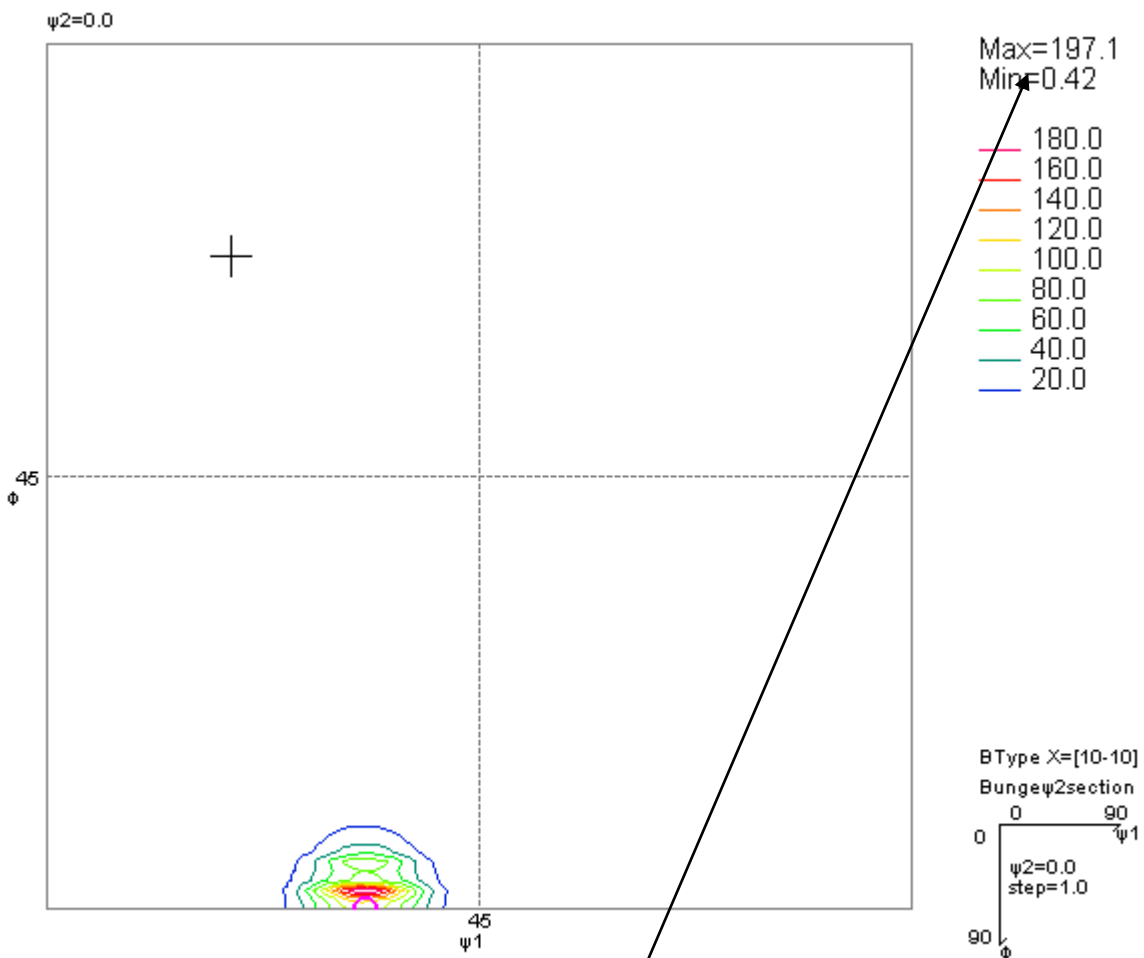




TexTools (HexagonalはA-Typeで計算される)



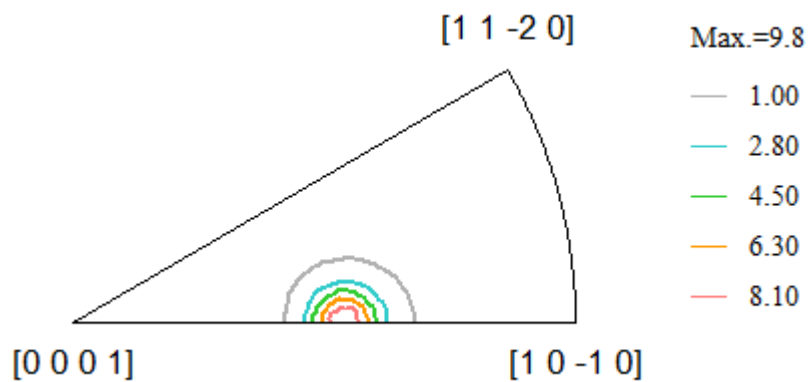
B-Typeに変換してCTRで読み込み



$(-1,2,-1,0)[12,0,-12,5]f_1=33.2,F=90.0,f_2=0.0$  ODF=106.09

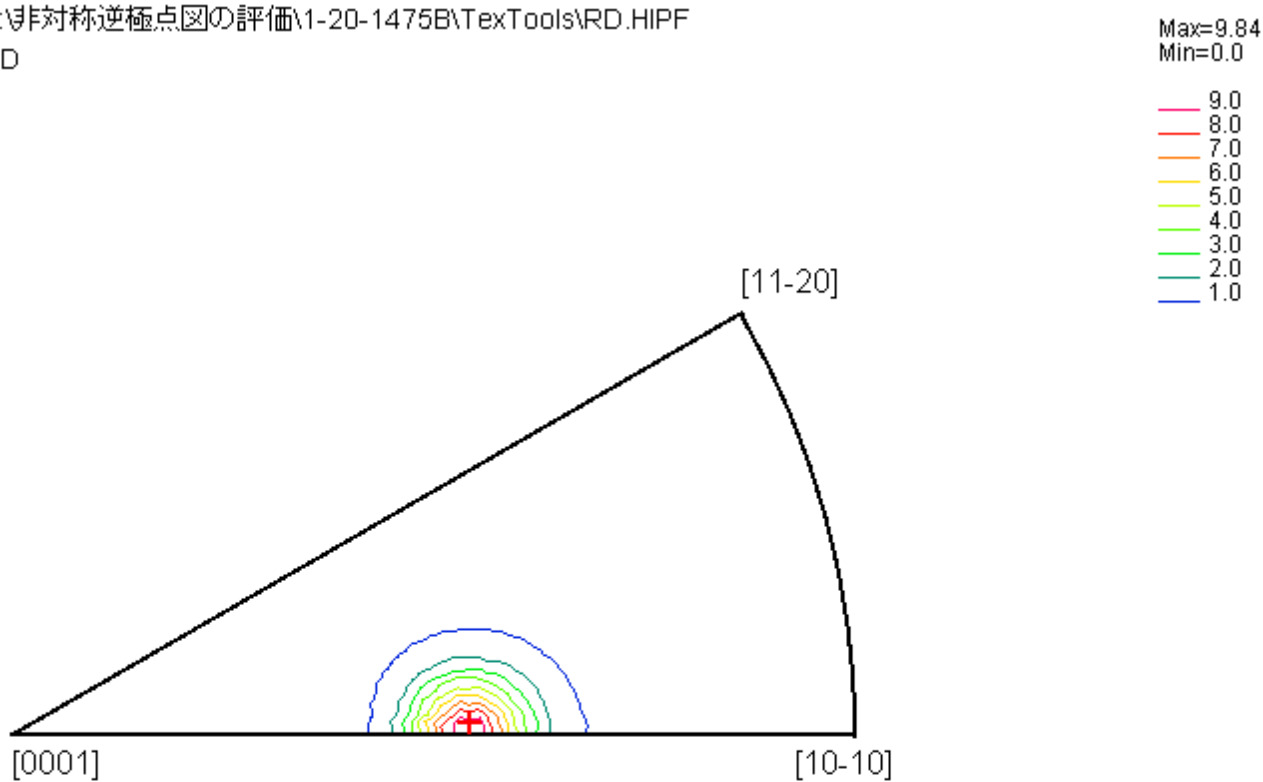
最大位置がずれている。

計算されたRD逆極点図



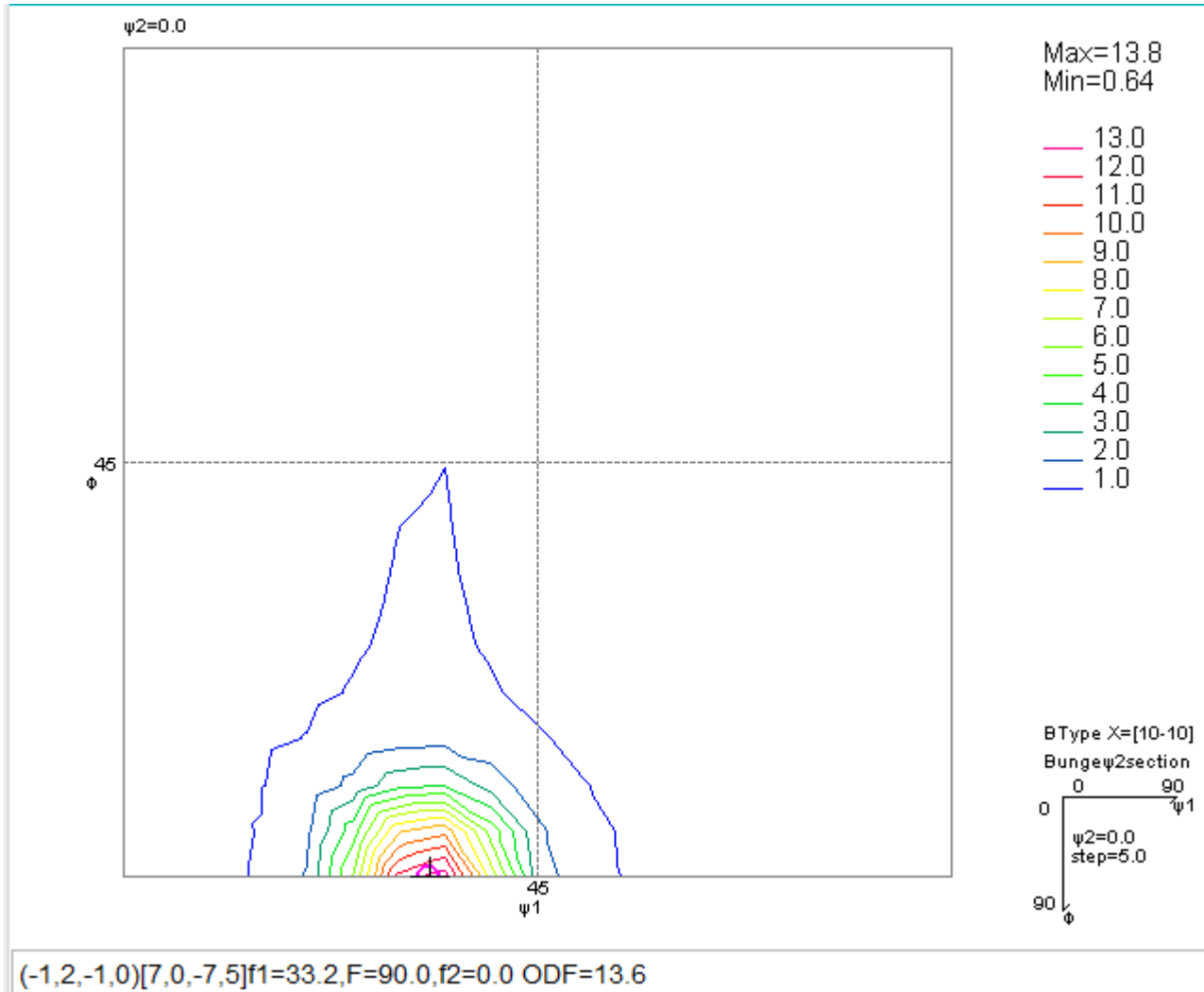
CTRソフトウェアで計算

U:\非対称逆極点図の評価\1-20-1475B\TexTools\RD.HIPF  
RD

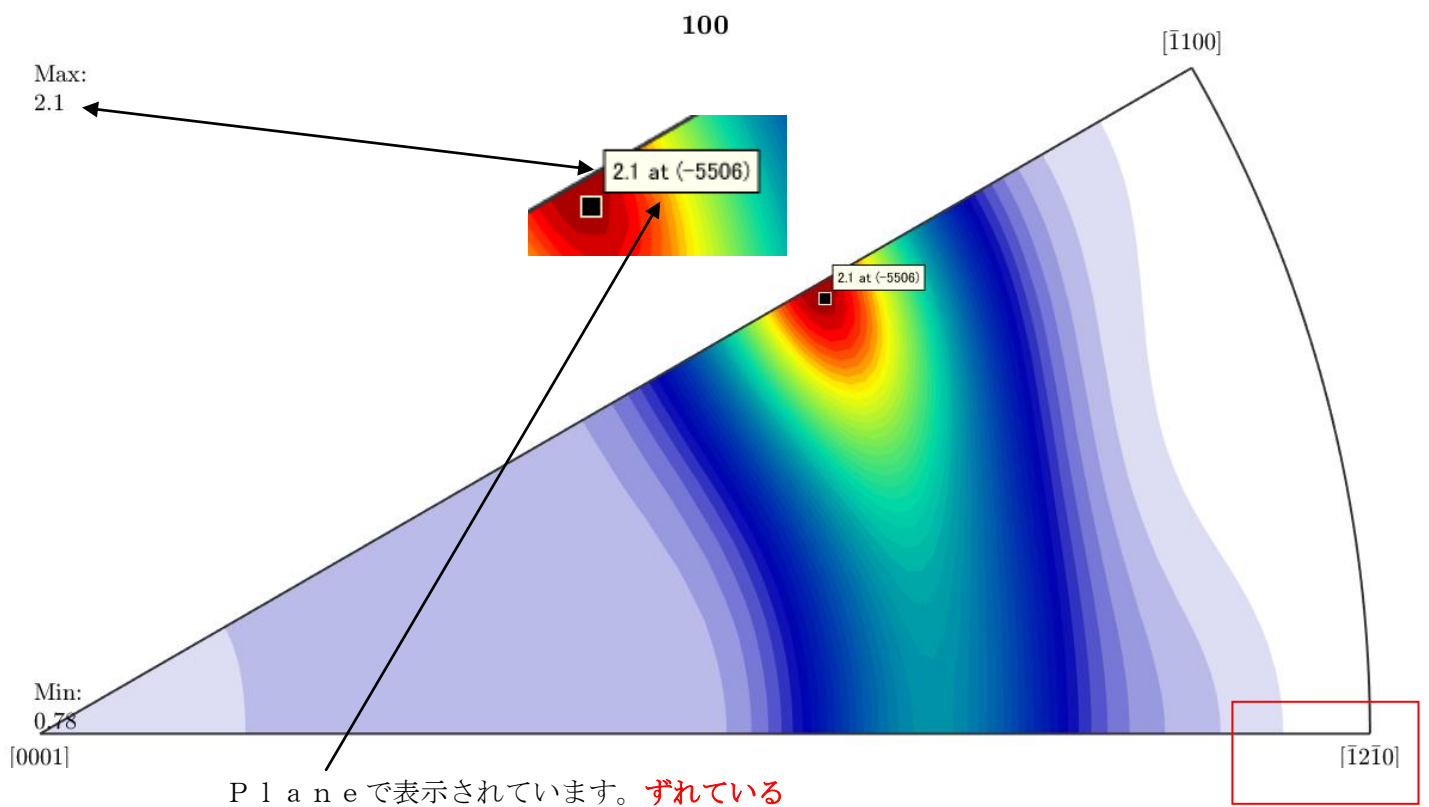


( $\varphi=57.0$   $\beta=31.7$ )  $Z=8.94 \rightarrow (5,0,-5,6)$

LaboTex とほぼ一致



ODF図にずれなし

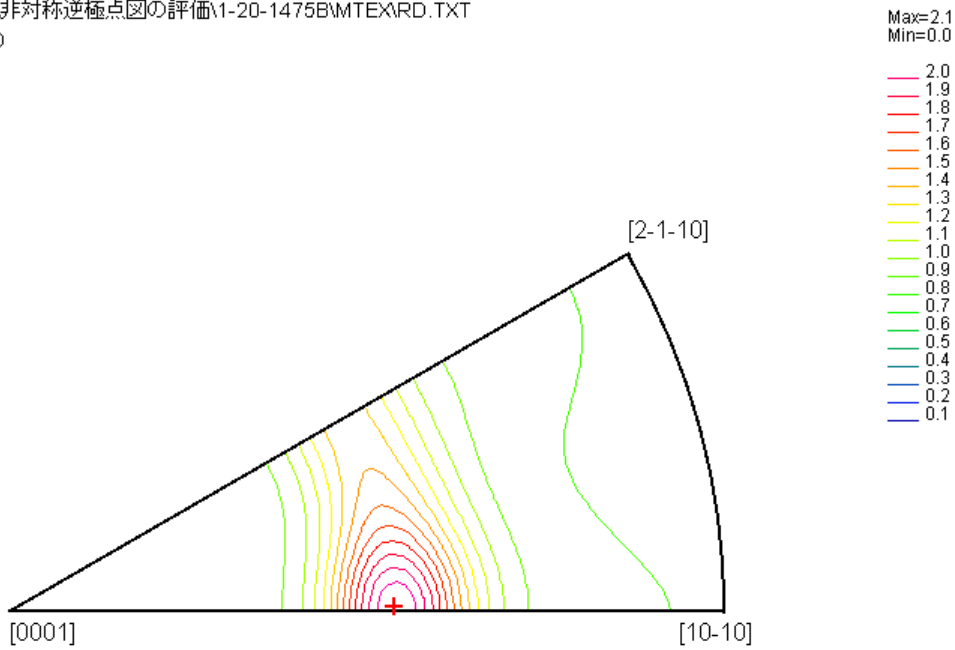


MTEXのRD逆極点図評価

CTR逆極点図では、MTEXの表示は見難いので $\beta$ 角度を逆転して表示しています。

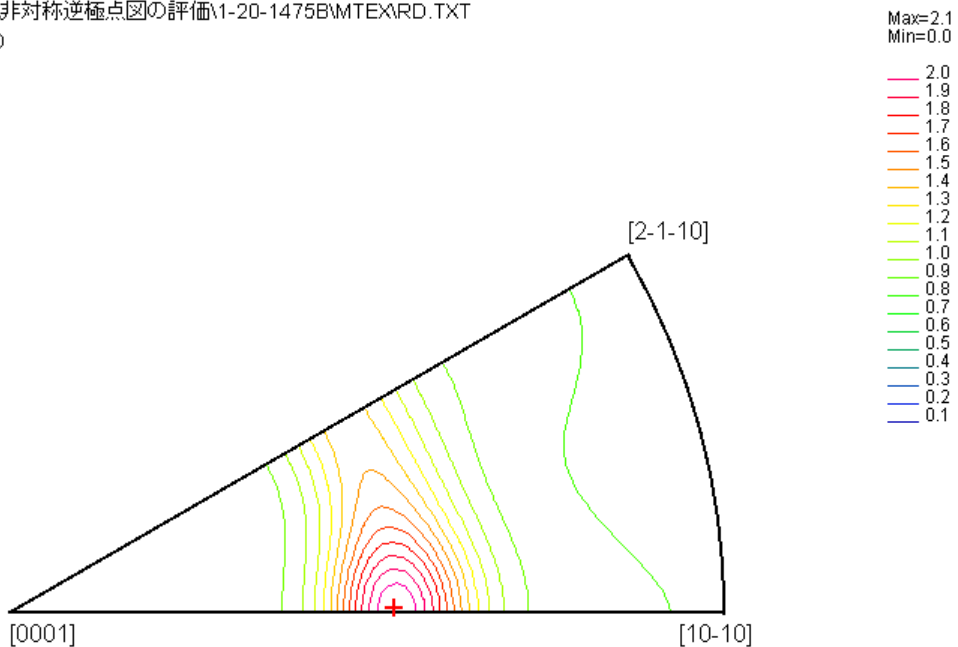
Plane表示

U:\非対称逆極点図の評価\1-20-1475B\MTEX\RD.TXT  
RD



( $\varphi=56.5$   $\beta=29.2$ )  $Z=2.09 \rightarrow (5,0,-5,6)$

U:\非対称逆極点図の評価\1-20-1475B\MTEX\RD.TXT  
RD



( $\varphi=56.5$   $\beta=29.2$ )  $Z=2.09 \rightarrow [4,0,-4,3]$

最大位置は  $\varphi$  60.46  $\beta$  30 ではない。約3度のずれ

TeXToolsデータ

Hexagonal, Resolution = 1.00, 91 x 361↓  
 1.00 1.00 1.59 90.00 90.00 120.00↓

30deg								
50	2.6181	3.2626	3.0407	<b>3.2</b>	3.0407	3.2626	2.6181	
51	3.5338	4.3322	4.1891	<b>4.3164</b>	4.1891	4.3322	3.5338	
52	4.7108	5.8571	5.5931	<b>5.7465</b>	5.5931	5.8571	4.7108	
53	5.3253	6.6318	6.2875	<b>6.4498</b>	6.2875	6.6318	5.3253	
54	6.6627	7.7628	8.1101	<b>7.8333</b>	8.1101	7.7628	6.6627	
55	7.3188	8.3526	8.658	<b>8.4618</b>	8.658	8.3526	7.3188	
56	<b>8.3061</b>	<b>9.4709</b>	<b>9.835</b>	<b>9.6206</b>	<b>9.835</b>	<b>9.4709</b>	<b>8.3061</b>	
57	7.9118	8.9358	9.247	9.1083	9.247	8.9358	7.9118	
58	8.3365	9.1669	9.5718	<b>9.6433</b>	9.5718	9.1669	8.3365	
59	7.2333	7.9275	8.2433	<b>8.3521</b>	8.2433	7.9275	7.2333	
60	6.4771	6.9665	7.2648	<b>7.5628</b>	7.2648	6.9665	6.4771	
61	5.2842	5.5985	5.867	<b>6.1317</b>	5.867	5.5985	5.2842	

$\beta = 30 \text{ deg}$  に対して対称データが出力される。  
 LaboTexのAverageデータと思われる。  
 $\phi$ のずれは4度

MTEXデータ

描画領域のデータのみ (30 x 90)

LaboTex

91 x 91データ

$\beta = 30 \text{ deg}$  に対して非対称データを出力

LaboTex等高線描画は描画とデータが逆転しています。

明らかに、各種ODF解析結果の逆極点データにずれが発生していますが、理由は不明

今回、Hexagonalで確認出来ましたが、他の結晶系では??