

# LaboTex、TexToolsの体積分率

2008年12月04日

HelperTex

## 概要

ODFの定量評価にODF極（方位）密度と体積分率で評価が行われる。しかし、ODF極密度と体積分率に相関がない事を、事あるごとに記載してきた。ODFで体積分率を計算することは結晶方位計算では重要である。

今回、L a b o T e xの VolumeFraction と T e x T o o l sの VolumeFraction を比較する。

L a b o T e xの VolumeFraction には IntegrationMethod と ModelFunctions Method がある。

T e x T o o l sでは、Ideal Orientatios がある。

以下で、その機能と実際を説明する。

## ODF極（方位）密度

単位体積当たりの結晶方位密度。結晶方位分布関数のE u l e r 角度ステップ幅に依存しない。

## 体積分率

結晶方位の体積分率で、E u l e r 空間に広がりを持って規定される。

## 計算する方位

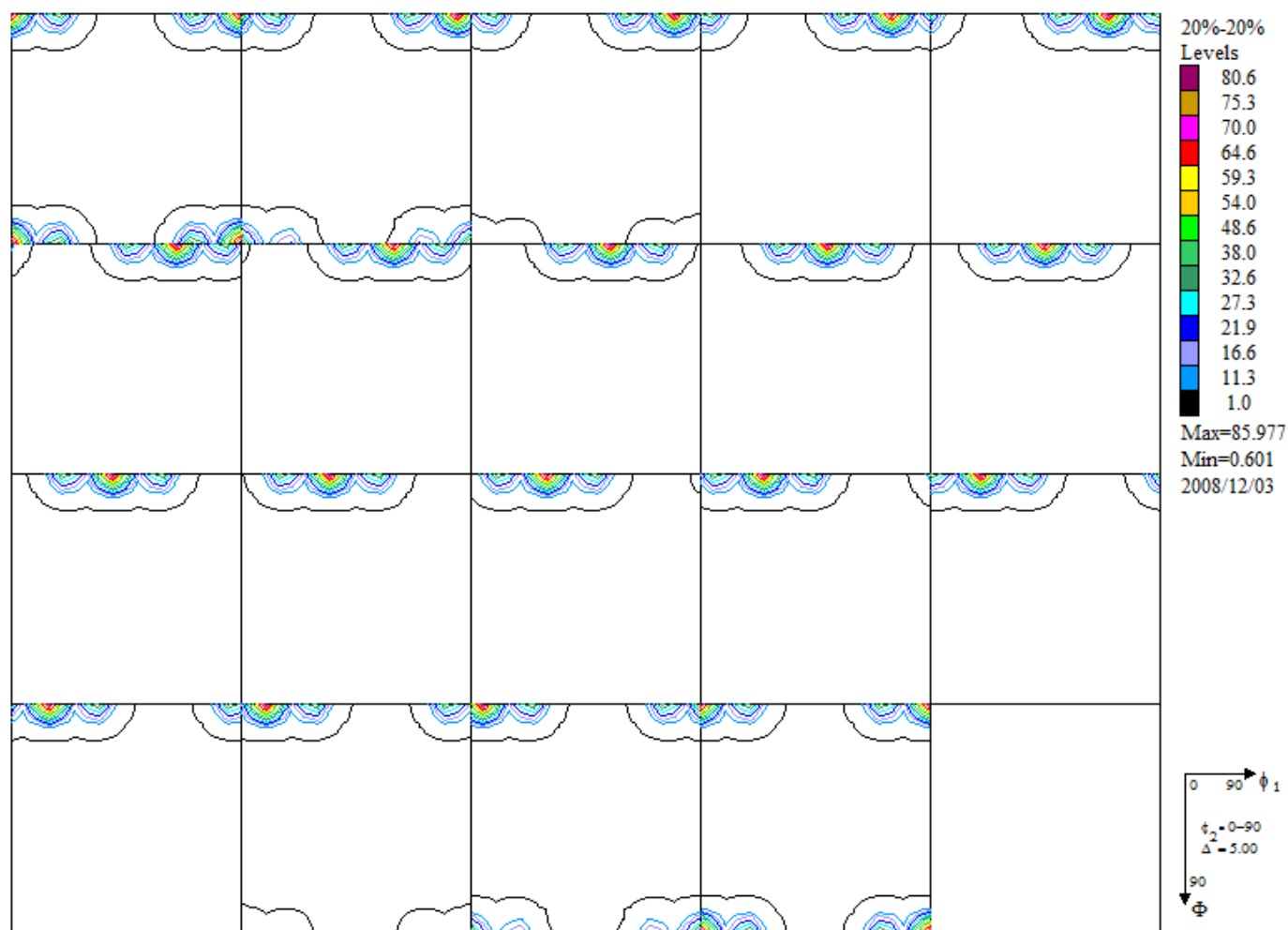
体積分率の広がりは、G a u s s 関数半価幅、 $\Delta\phi 1$ 、 $\Delta\Phi$ 、 $\Delta\phi 2$ で指定される。

結晶方位は  $\{001\} \langle 100 \rangle$  と  $\{001\} \langle 310 \rangle$  をそれぞれ体積分率20%

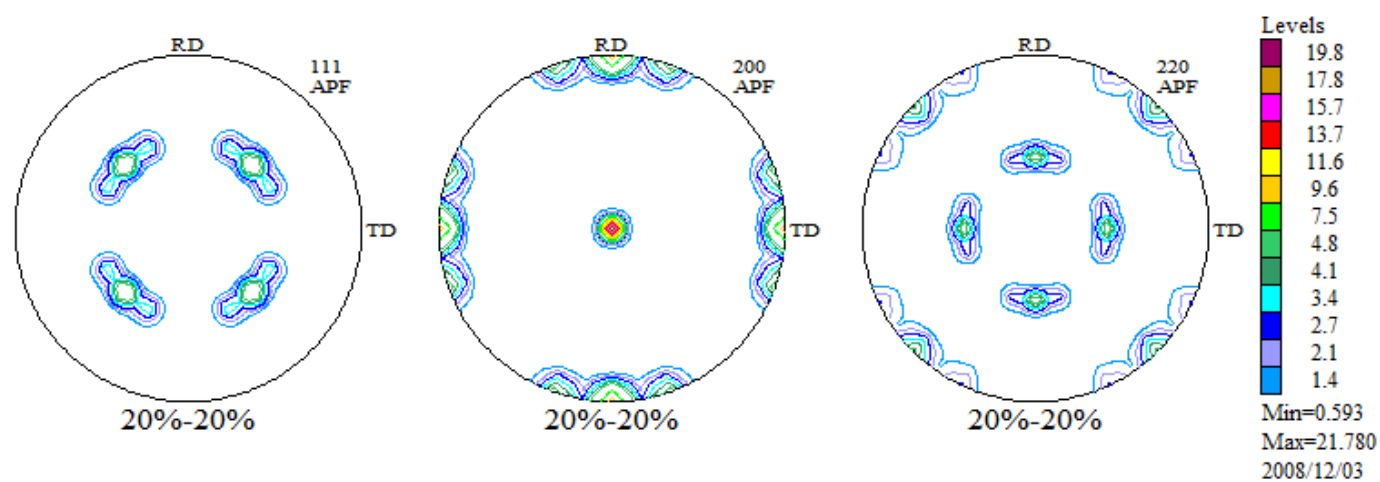
$\Delta\phi 1$ 、 $\Delta\Phi$ 、 $\Delta\phi 2$ を全て10.0度としたODFから極点図を作成し、各ソフトウェアの Volume Fraction を比べる。

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\Phi$	FWHM $\phi_2$	Volume Fraction
1	$\{001\} \langle 100 \rangle$ cube	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	20 %
2	$\{100\} \langle 013 \rangle$	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	20 %
3	$\{110\} \langle 1-12 \rangle$ brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
4	$\{123\} \langle 41-2 \rangle$ R	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
5	$\{231\} \langle -34-6 \rangle$ S-4	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	$\{231\} \langle 3-46 \rangle$ S-2	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	$\{213\} \langle -3-64 \rangle$ S-3	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	$\{132\} \langle 6-43 \rangle$ S-1	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	$\{525\} \langle 1-51 \rangle$	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	$\{013\} \langle 100 \rangle$	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

計算されたODF分布

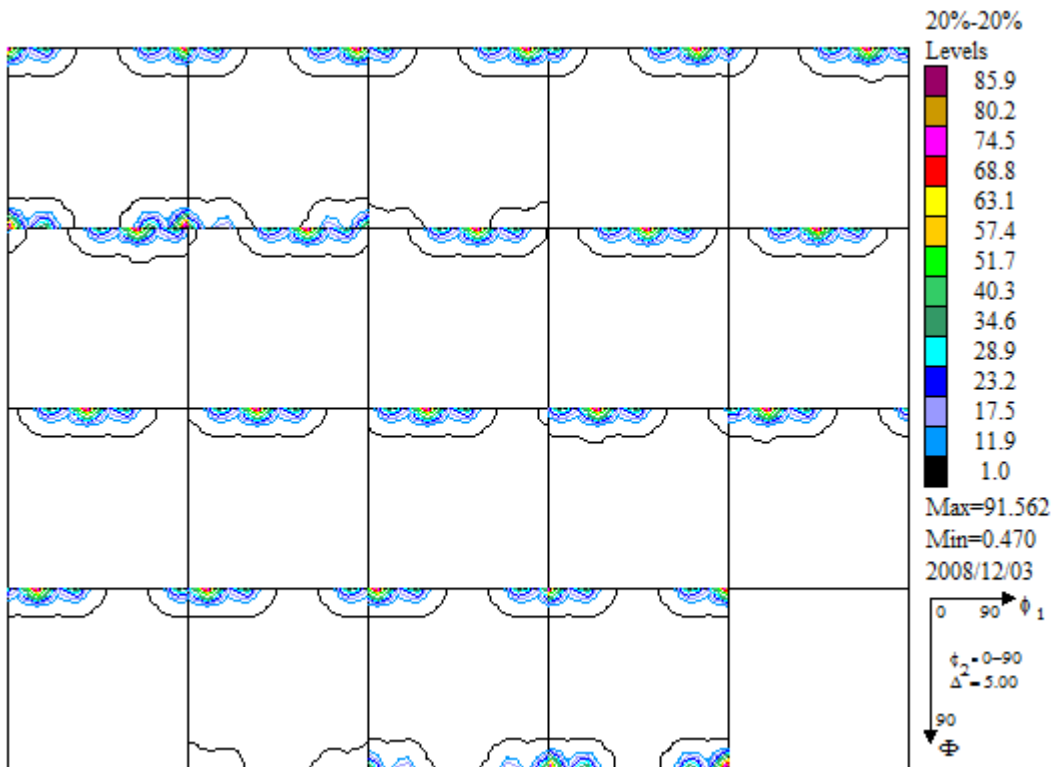


計算された極点図



# LaboTex Integration Method

上記極点図をLaboTexで読みこみ、ODF極密度の計算



ODF方位（極）密度は

ODF Values for Orientations from Database (Sort by ODF Values)

Project : Demo  
Sample : 20%-20%

Symmetry : O-Cubic  
Job : 1

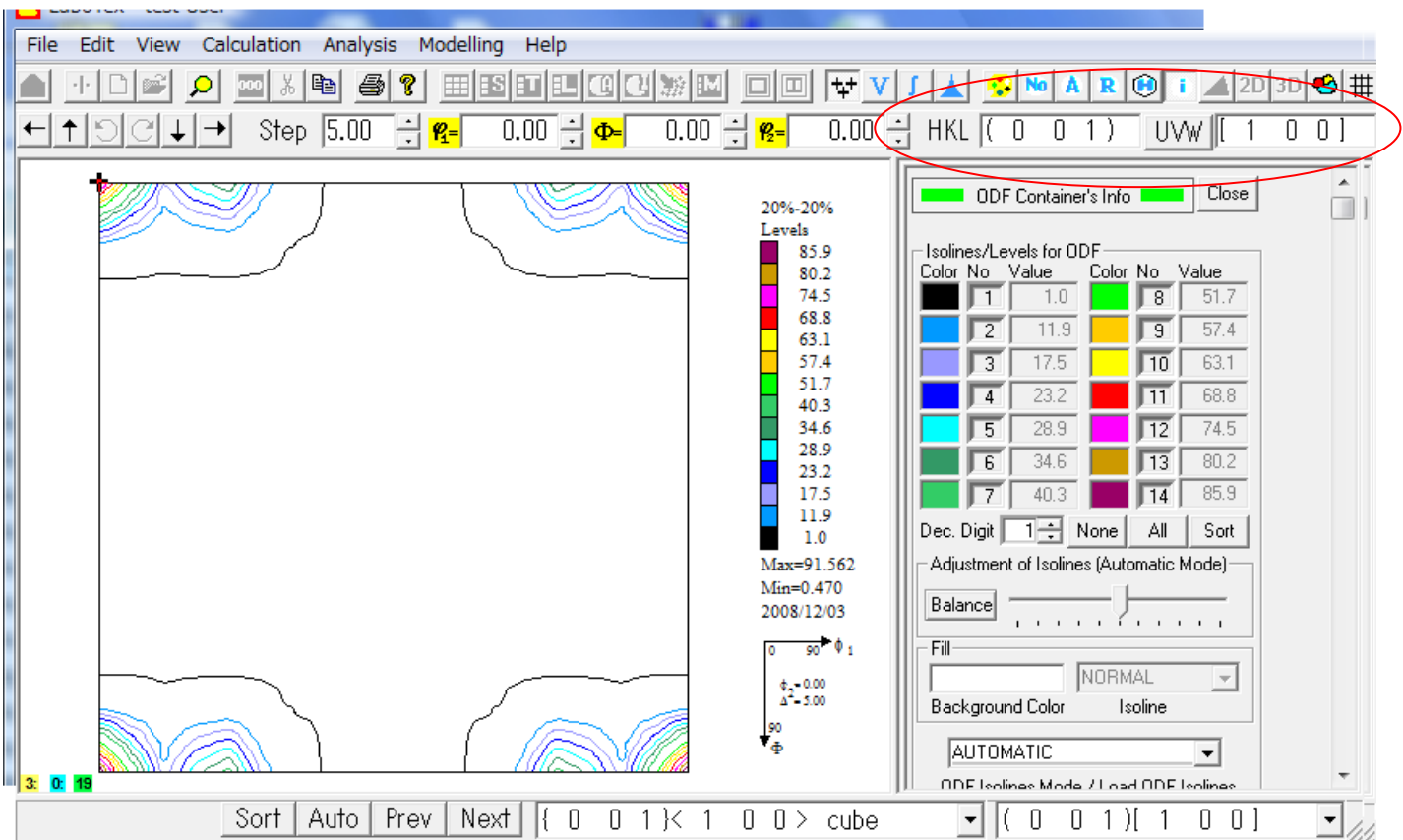
No	Orientation Type Name	ODF (average)
1	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	88.497
2	{ 1 0 0 } < 0 1 3 >	38.286
3	{ 0 0 1 } < 4 1 0 >	29.402
4	{ 0 0 1 } < 5 1 0 >	20.313
5	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	0.664
6	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	0.649
7	{ 1 2 2 } < 2 -2 1 >	0.645
8	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	0.623
9	{ 1 1 3 } < 1 -1 0 >	0.622
10	{ 70.10, 0.00, 70.10 } TEST(001)[-6	0.61
11	{ 0 0 1 } < -6 -5 0 >	0.619
12	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	0.610
13	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >	0.610
14	{ 1 1 1 } < 0 1 -1 >	0.606
15	{ 1 1 1 } < -1 -1 2 >	0.605
16	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	0.605
17	{ 83.00, 33.00, 90.00 } Cursor !!!	0.601
18	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	0.601
19	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	0.601
20	{ 2 3 1 } < -3 4 -6 > S-4	0.601
21	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	0.601
22	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R	0.600
23	{ 1 1 2 } < 1 -1 0 >	0.600
24	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	0.600
25	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	0.594
26	{ 2 3 3 } < 0 1 -1 >	0.576

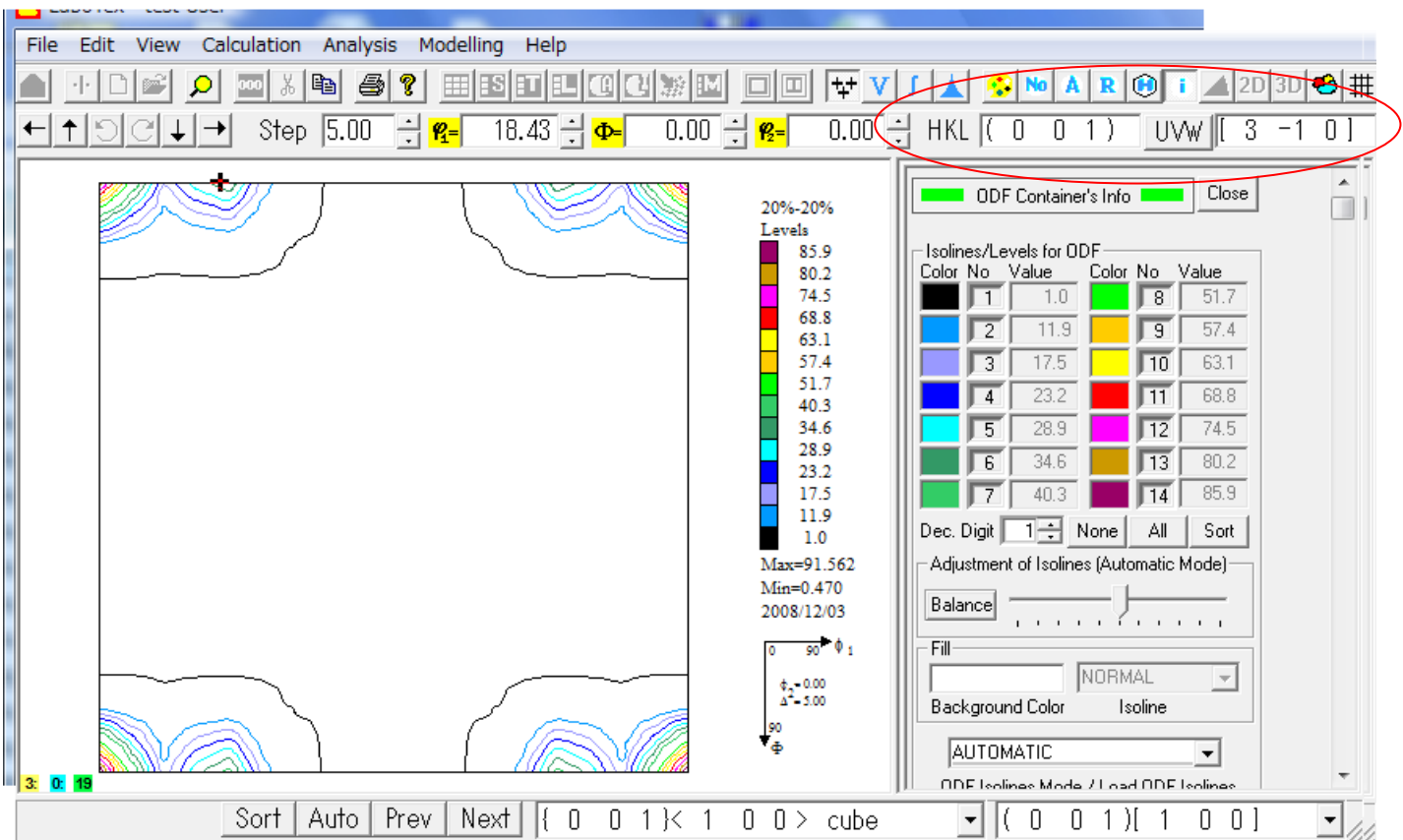
(HKL)[UVW]	$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$	ODF
{ 0 1 0 } [ 1 0 0 ]	0.0	90.0	0.0	91.608
{ 1 0 0 } [ 0 -1 0 ]	0.0	90.0	90.0	91.608
{ 0 1 0 } [ 0 0 1 ]	90.0	90.0	0.0	91.562
{ 1 0 0 } [ 0 0 1 ]	90.0	90.0	90.0	91.562
{ 0 0 1 } [ 1 0 0 ]	0.0	0.0	0.0	85.431
{ 0 0 1 } [ 0 -1 0 ]	0.0	0.0	90.0	85.431
{ 0 0 1 } [ 0 -1 0 ]	90.0	0.0	0.0	85.388
{ 0 0 1 } [ -1 0 0 ]	90.0	0.0	90.0	85.388

View Report      OK      Cancel

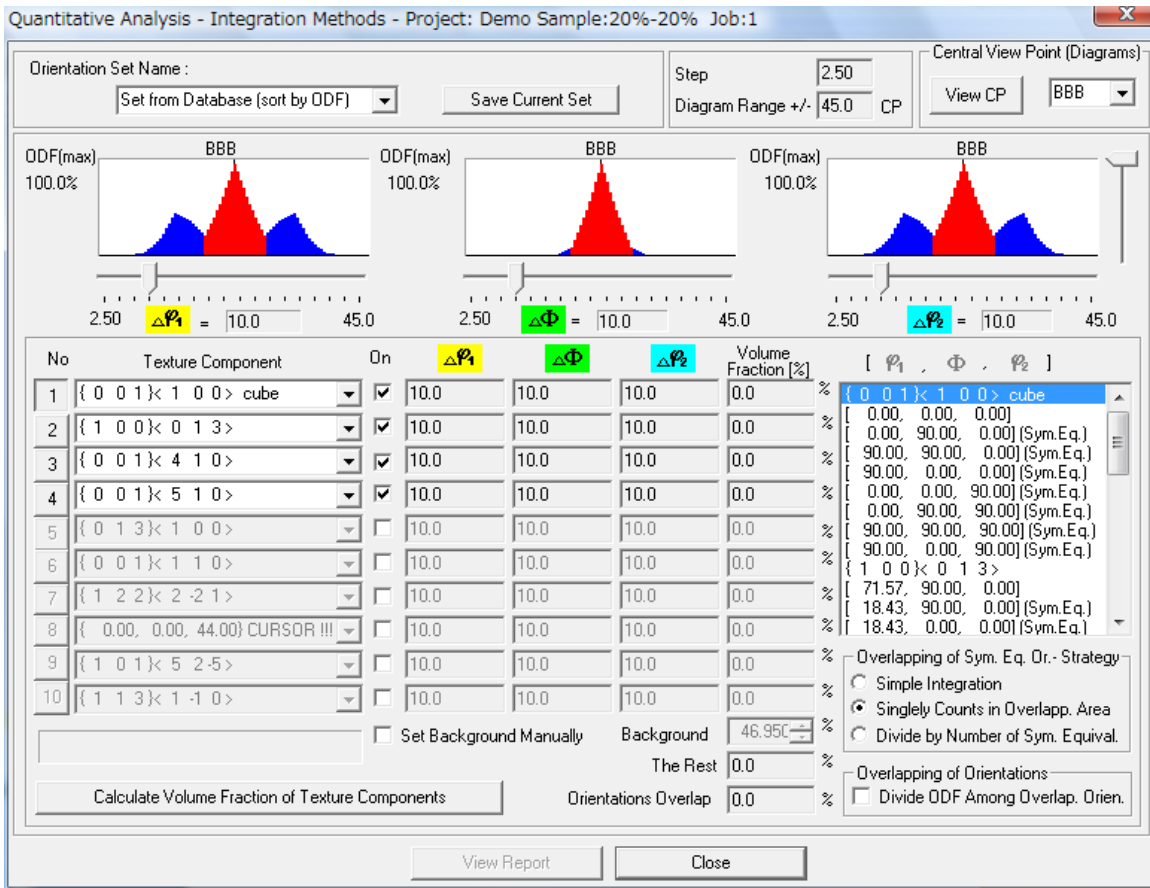
{001} <100>方位の確認



{001} <310>方位の確認

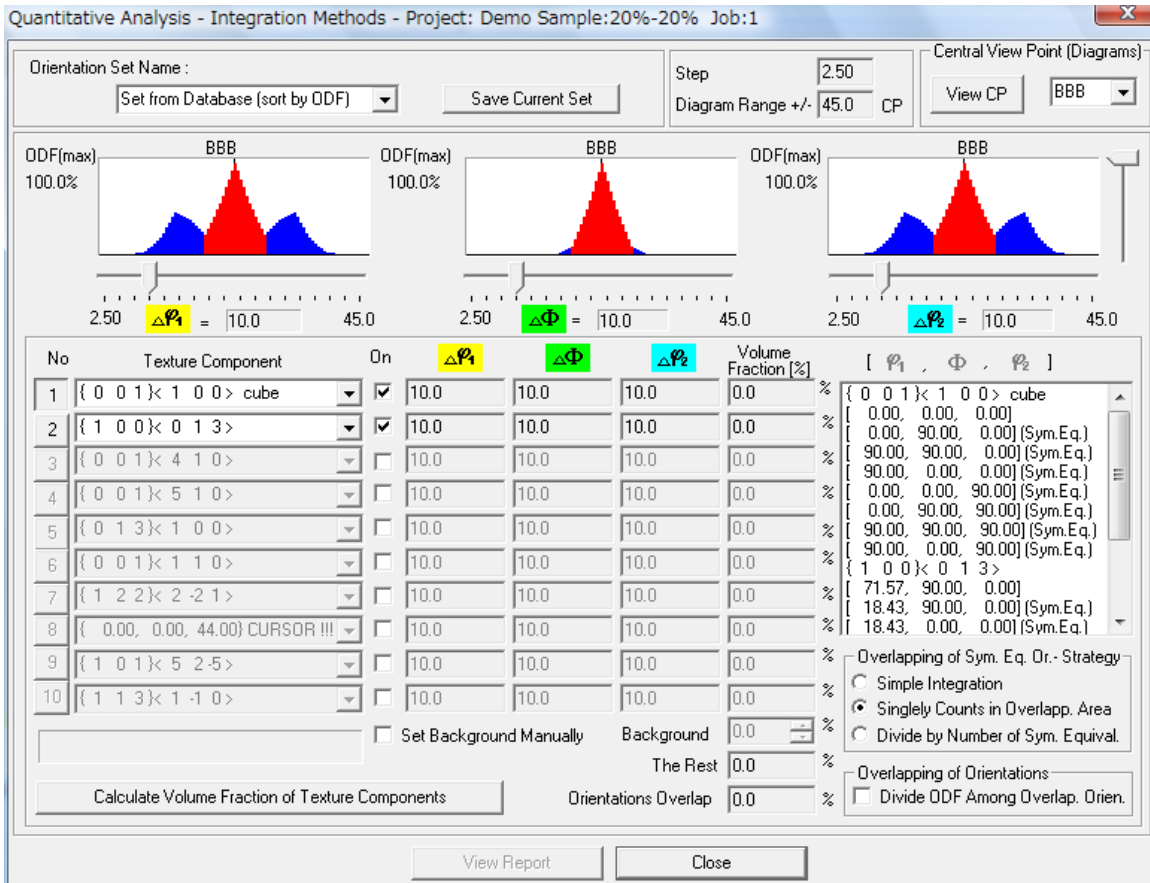


# Integration Method



可能性のある方位が自動的に表示されている。

確認された結晶方位のみを指定



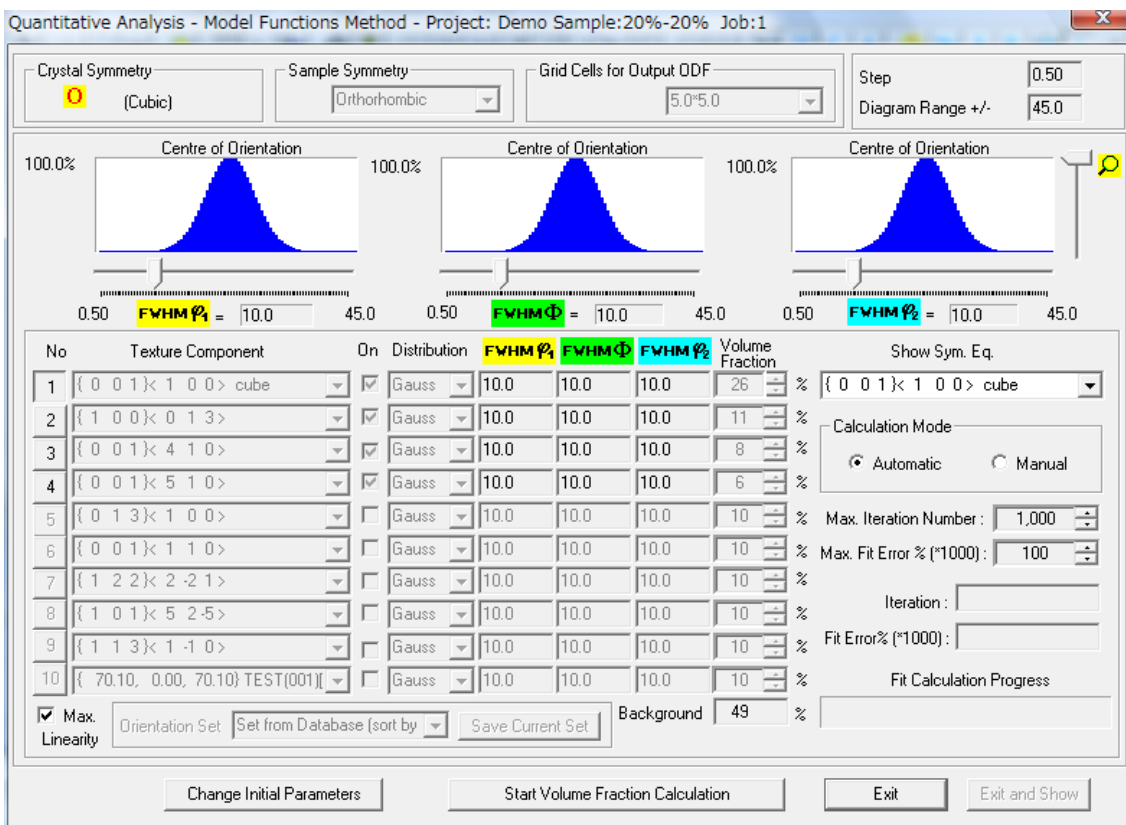
目視で、 $\Delta\phi_1$ 、 $\Delta\Phi$ 、 $\Delta\phi_2$  を指定して計算開始



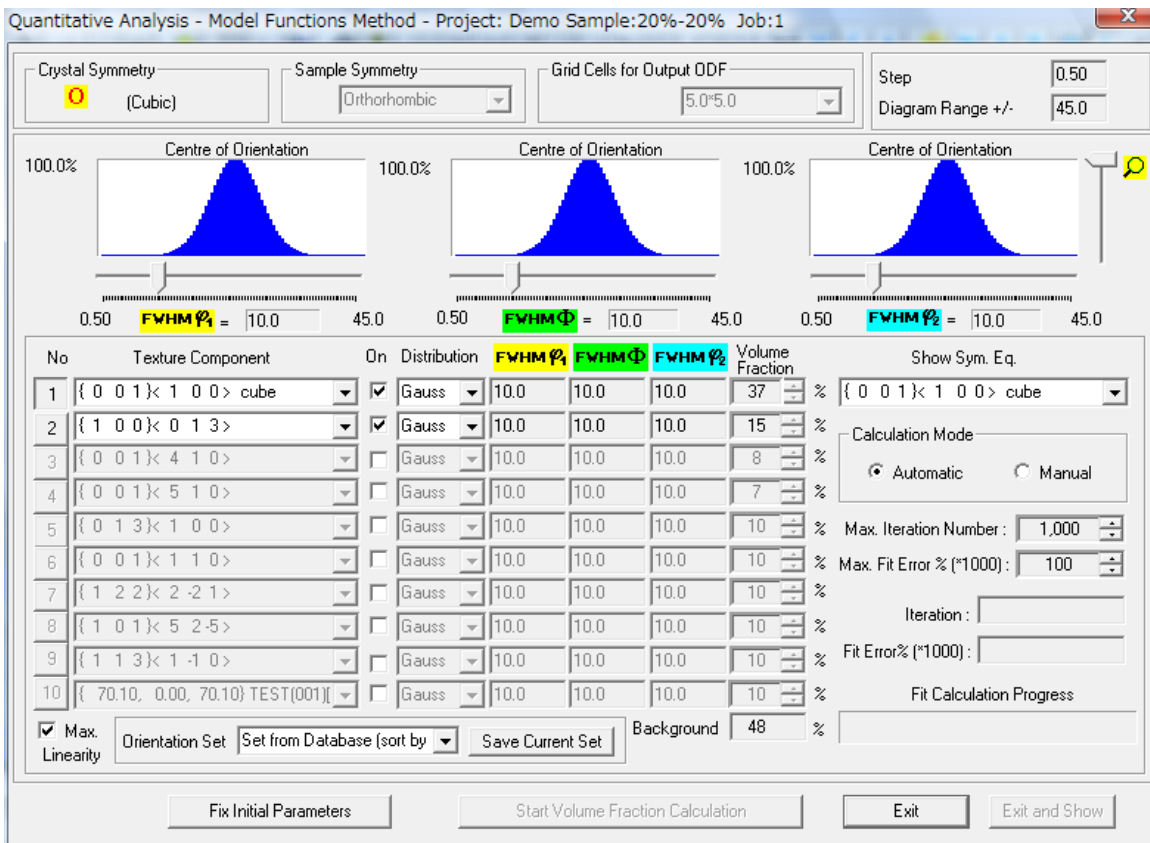
定量値を得る。(バックグラウンドも含まれる)

### Model Function Method

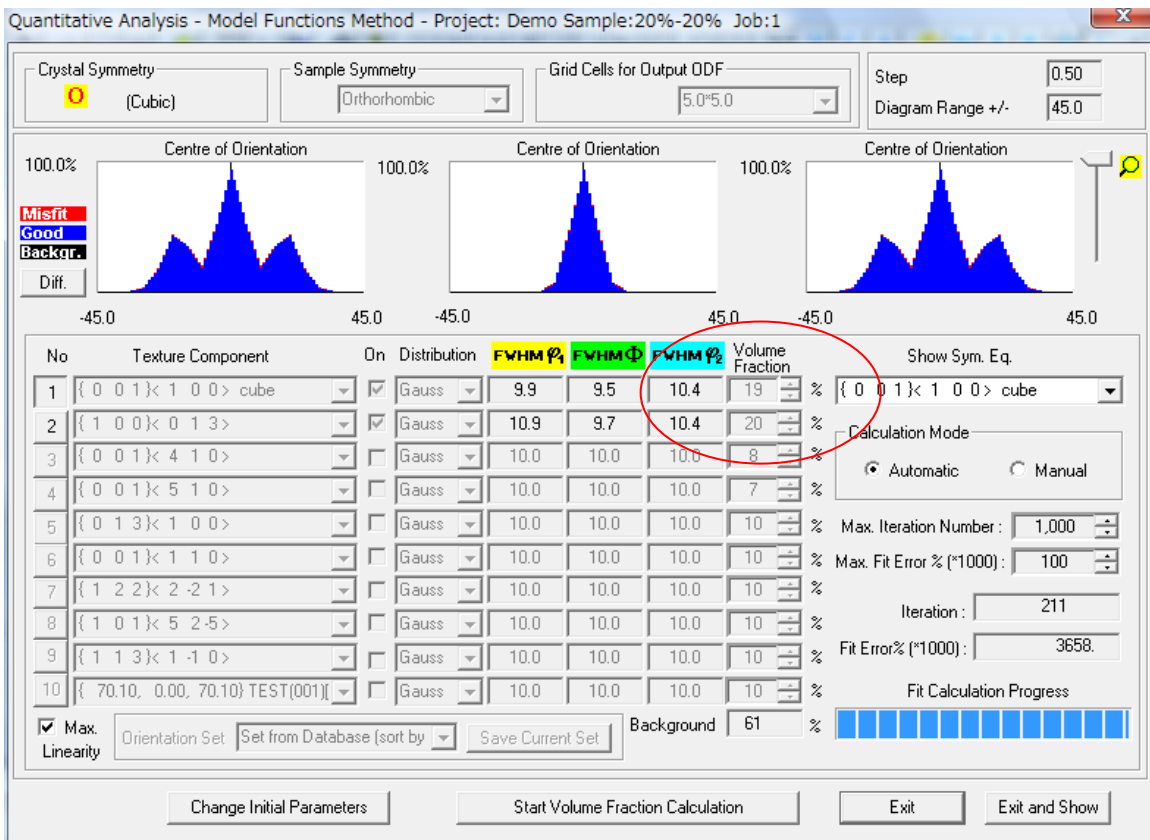
大まかな結晶方位の確認は、Integration Methodと同じ



{001} <100>と {001} <310>を選択



計算開始



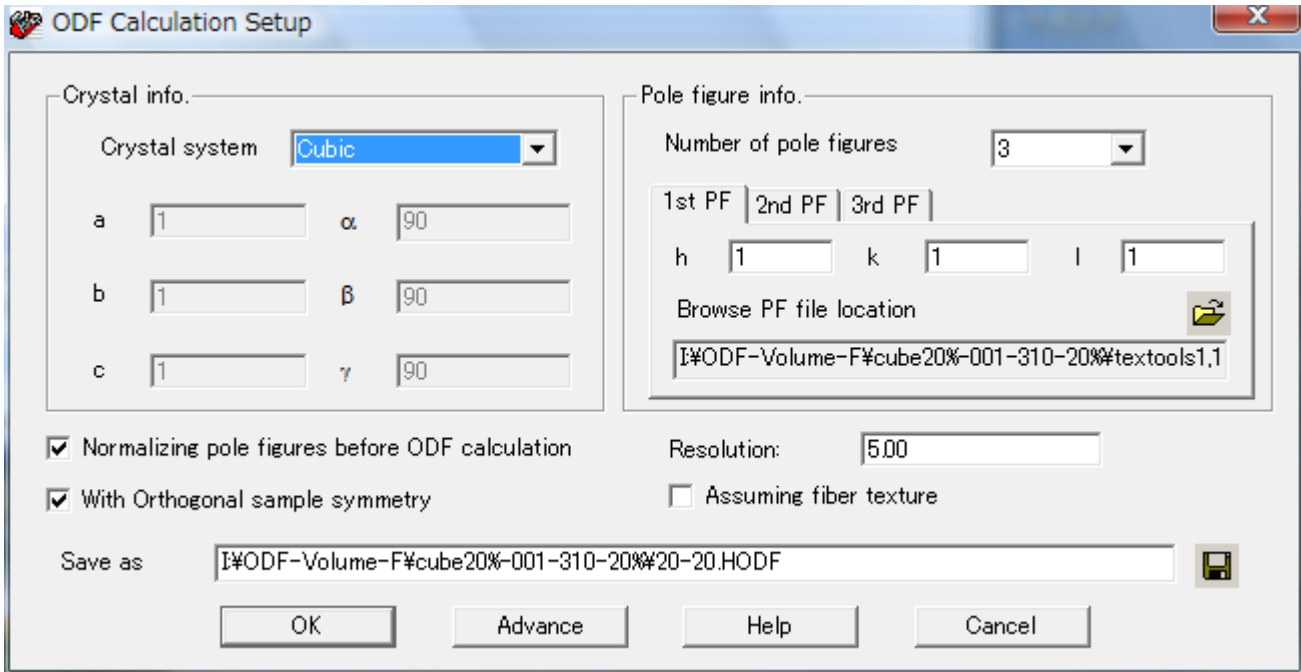
繰り返し計算し定量値を得る。△ $\phi$  1、△ $\Phi$ 、△ $\phi$  2は自動的に計算される。

バックグラウンドは方位とは別に計算される。

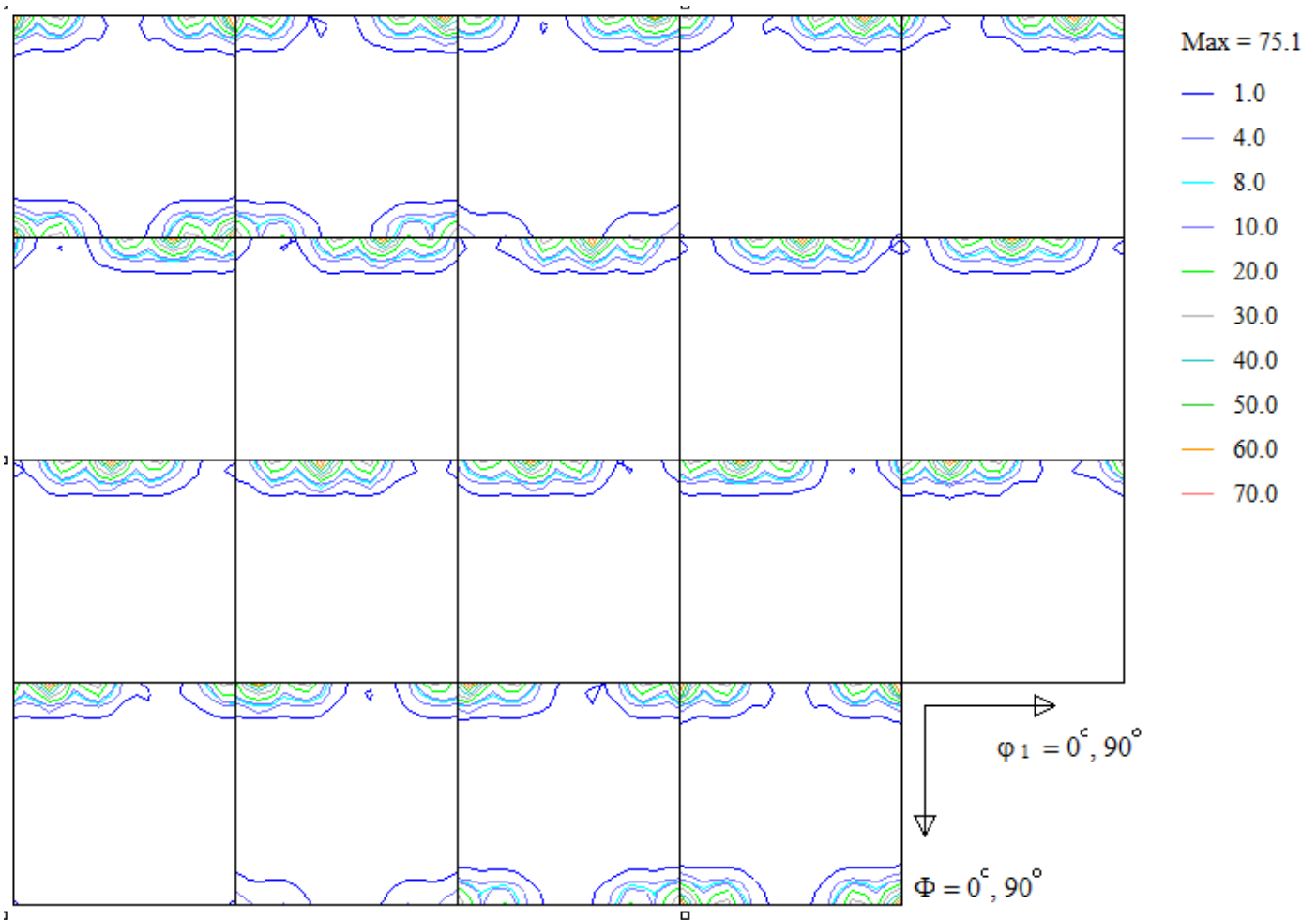


# TexToolsによる体積分率

## 極点データの読み込み



## ODF 計算



結晶方位最大極密度は、laboTex (91.56であった) とは異なる。

Volume Fraction (Ideal Orientations and Fibers)

Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Cube component

$\phi 1$  0    $\Phi$  0    $\phi 2$  0

Tolerance (degree) 15

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

gamma fiber (phi = 55, phi2 = 45)

h 1   k 1   l 1

Tolerance (degree) 15

ODF File Name

Result:

Calculate

Cancel

{0 0 1} < 1 0 0 > の計算

Tolerance(degree)に 12.5 度を与えて計算

Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Cube component

$\phi 1$  0    $\Phi$  0    $\phi 2$  0

Tolerance (degree) 125

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

gamma fiber (phi = 55, phi2 = 45)

h 1   k 1   l 1

Tolerance (degree) 15

ODF File Name J:\ODF-Volume-F\cube20%-001-310-20%\20-20.HODF

Result: Cube=21.47%

Calculate

Cancel

(0 0 1) [3 - 1 0] は  $\phi 1 = 18.43$ 、 $\Phi = 0.0$ 、 $\phi 2 = 0.0$  度から

Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Other ideal orientations

$\phi 1$  18.43    $\Phi$  0    $\phi 2$  0

Tolerance (degree) 125

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

gamma fiber (phi = 55, phi2 = 45)

h 1   k 1   l 1

Tolerance (degree) 15

ODF File Name J:\ODF-Volume-F\cube20%-001-310-20%\20-20.HODF

Result: 21.67%

Calculate

Cancel

を得る。

## まとめ

ODFのVolume Fractionでは体積分率が計算出来る。ODF方位密度（ODF極密度）表現ではODFにより大きなバラツキが観察されているが、Volume Fractionではその差は見られない。しかし、Euler角度の広がり結果に大きく影響している。LaboTexでは目視で広がり指定出来たり、バックグラウンドを考慮したModelingによる自動化、更に同時に複数の結晶方位の体積分率が計算できる点、非常に使いやすい結果となった。