

非対称極点図のVolume Fraction

2014年10月25日

HelperTex Office

山田 義行

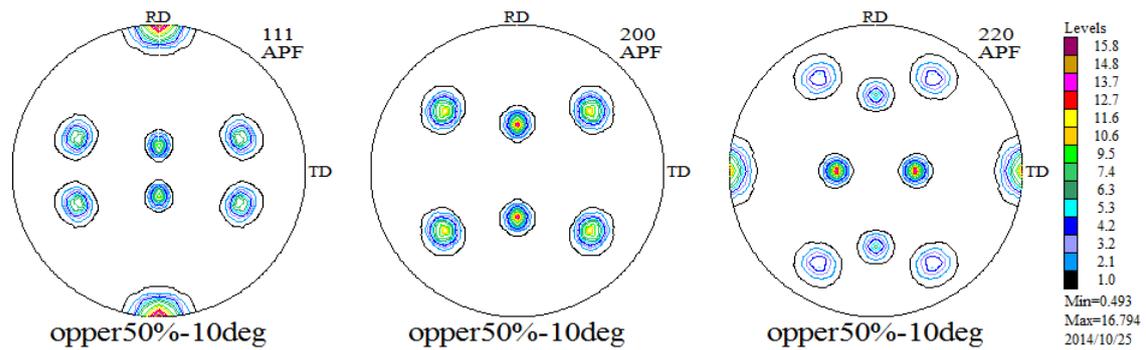
概要

極点図測定からODF解析を行う場合、極点図が上下非対称になることがあります。
本資料では、極点図がTD軸に対して回転している極点図に関してシュミレーションを行い、
非対称ODFと対称ODFの比較を行います。

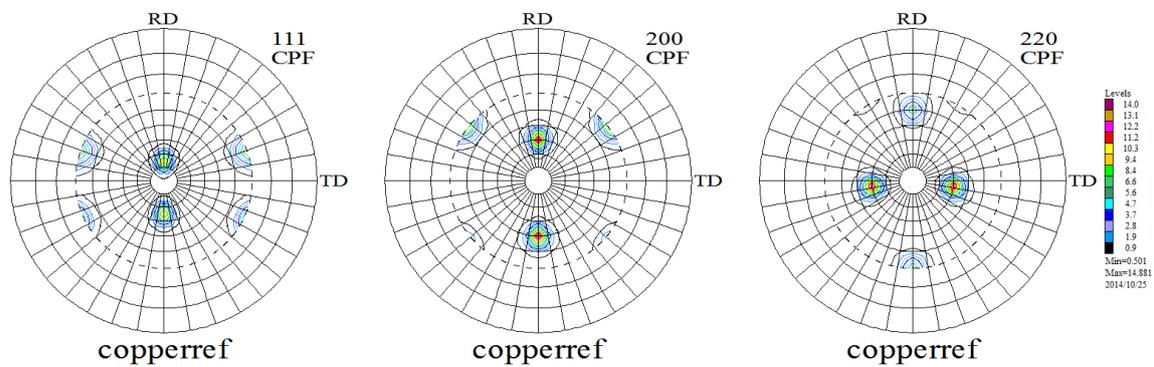
Copper方位の半価幅10deg、VolumeFraction50%極点図を作成
TD軸に対し、-5度回転を行い、反射法データを作成し、ODF解析を行う。

入力データ

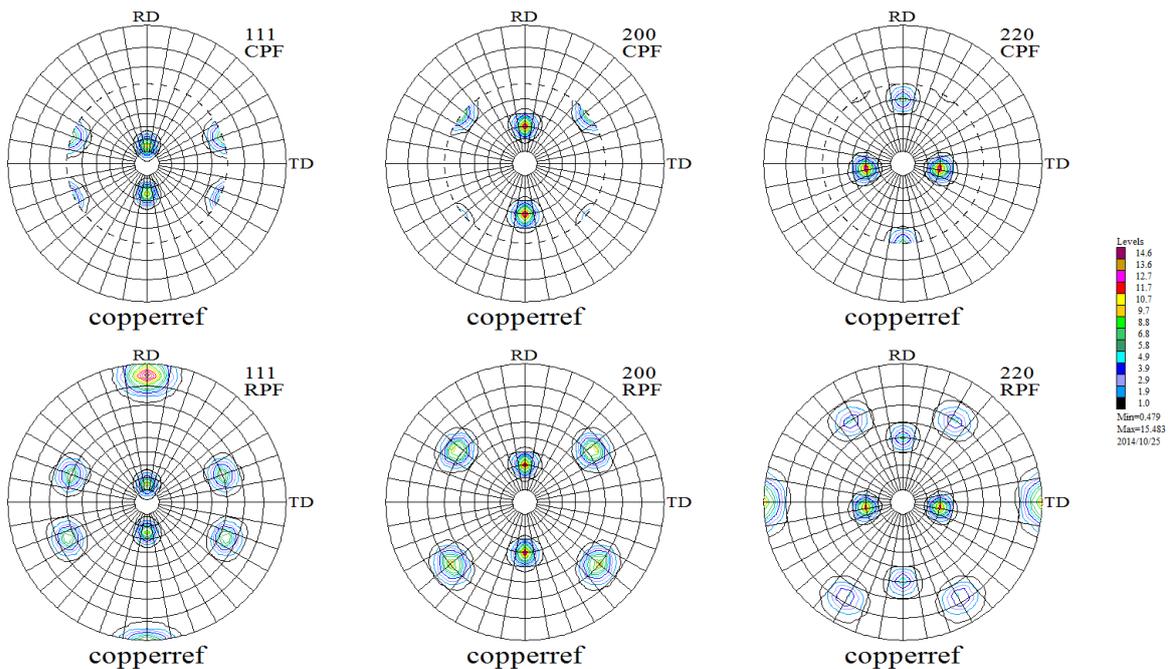
Copper方位50%の極点図



TD-5deg回転の反射極点図

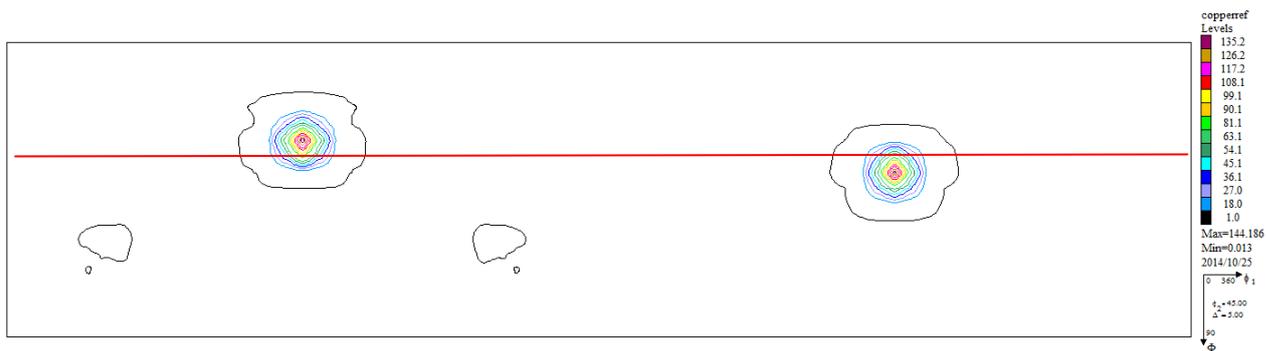


非対称ODF解析後の再計算極点図比較



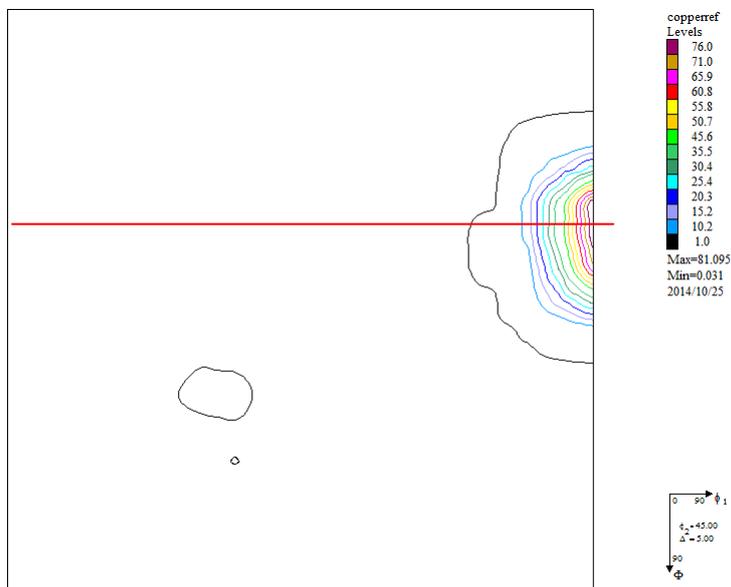
非対称でODF解析すると、入力極点図が再現されている。

非対称ODF解析の $\phi = 45$ 度(Copper 方位は $\phi = 45$ 度に現れる)

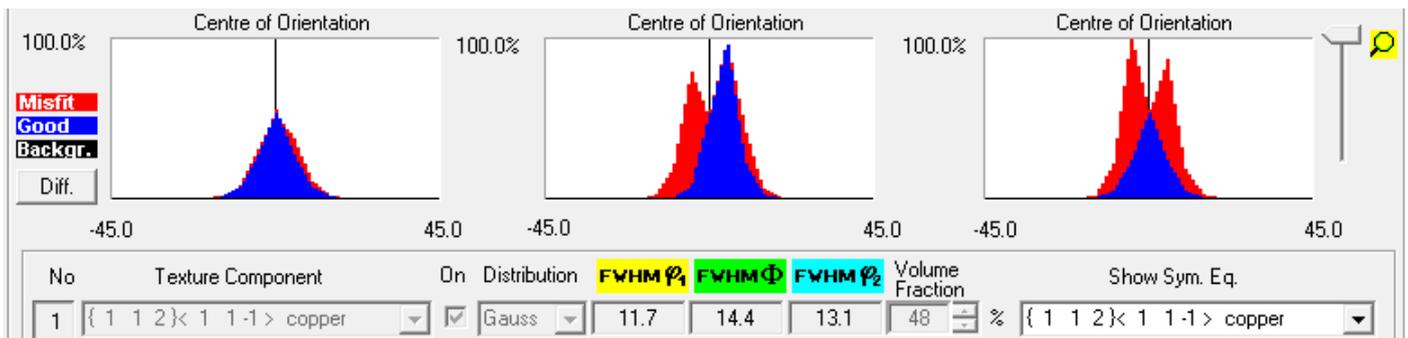


Copper方位は $\Phi = 35.26$ 度であるがずれている。

対称ODFで解析した $\phi = 45$ 度

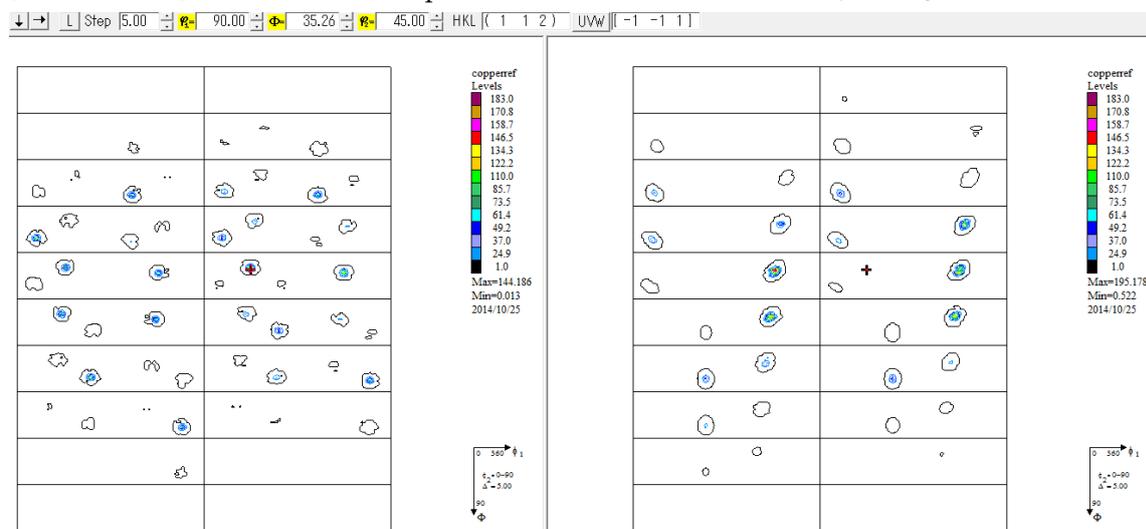


VolumeFraction計算



上図の ϕ_1 、 Φ 、 ϕ_2 図の中心が Copper であるが、VolumeFraction 結果は青で示されている。

50% に対し、48% と VolumeFraction はほぼ再現されるが、ODF 図は再現されない
調べてみると、 $\{112\} \langle -1-11 \rangle$ の付近である事が分かる。



Family を調べると

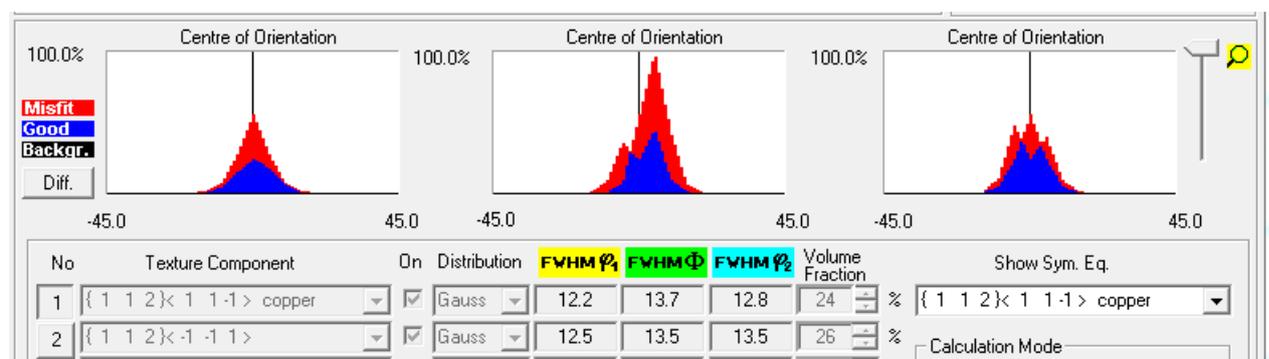
{ 1 1 2 } < -1 -1 1 >	[90.00, 35.26, 45.00]
{ 2 1 1 } < 1 -1 -1 >	[320.77, 65.91, 63.43]
{ 1 2 1 } < -1 1 -1 >	[219.23, 65.91, 26.57]

登録されている Copper の Family は

{ 1 1 2 } < 1 1 -1 >	[270.00, 35.26, 45.00]
{ 2 1 1 } < -1 1 1 >	[140.77, 65.91, 63.43]
{ 1 2 1 } < 1 -1 1 >	[39.23, 65.91, 26.57]

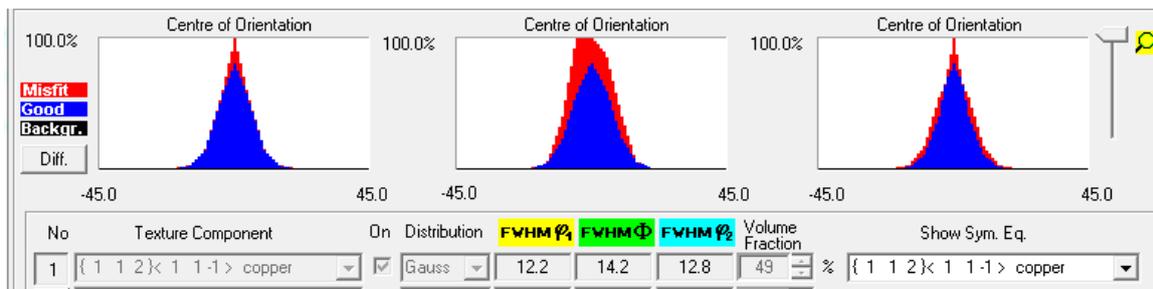
であるので、同じ Family に属する事がわかります。

新たに、 $\{112\} \langle -1-11 \rangle$ を登録して VolumeFraction 計算すると

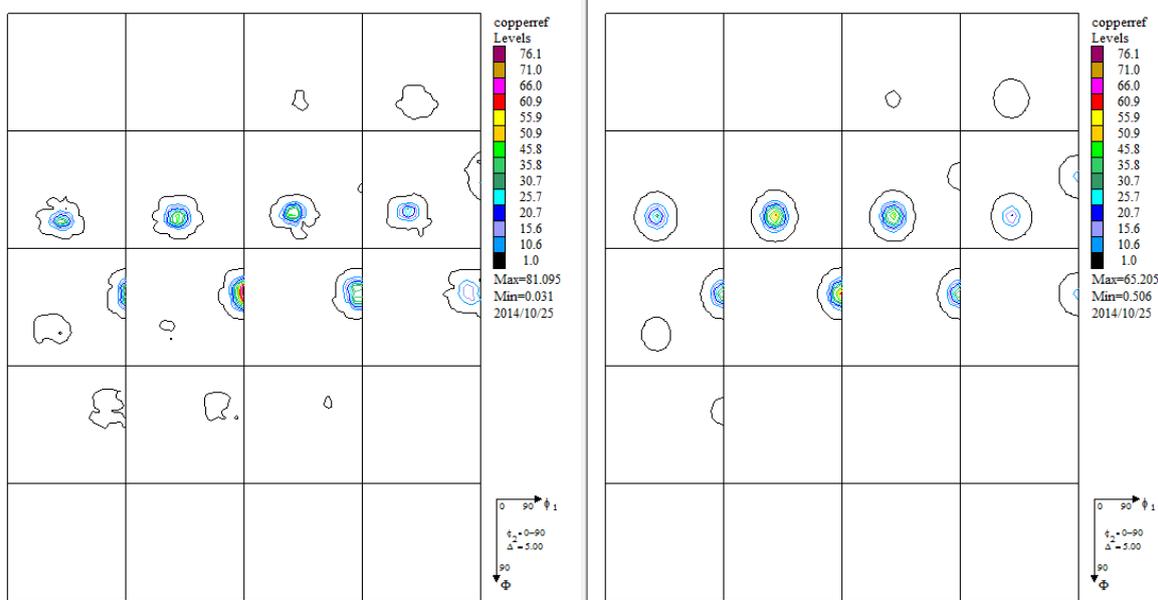


VolumeFraction 結果は良好になります。

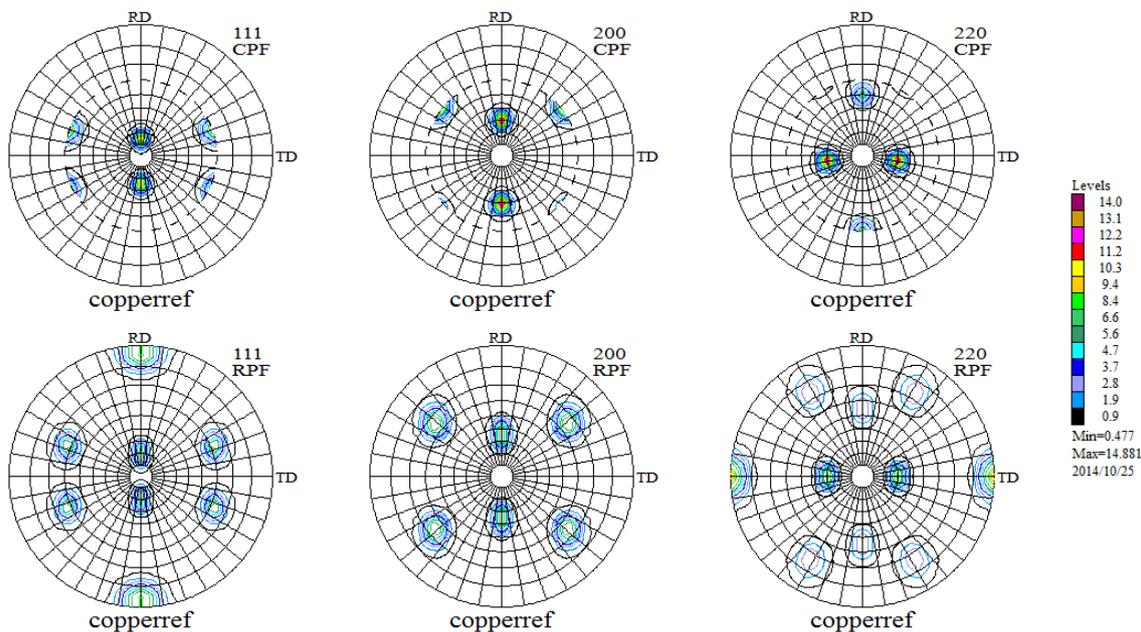
対称極点図としてVolume Fraction計算すると



見掛け上、一致度は良好になります。



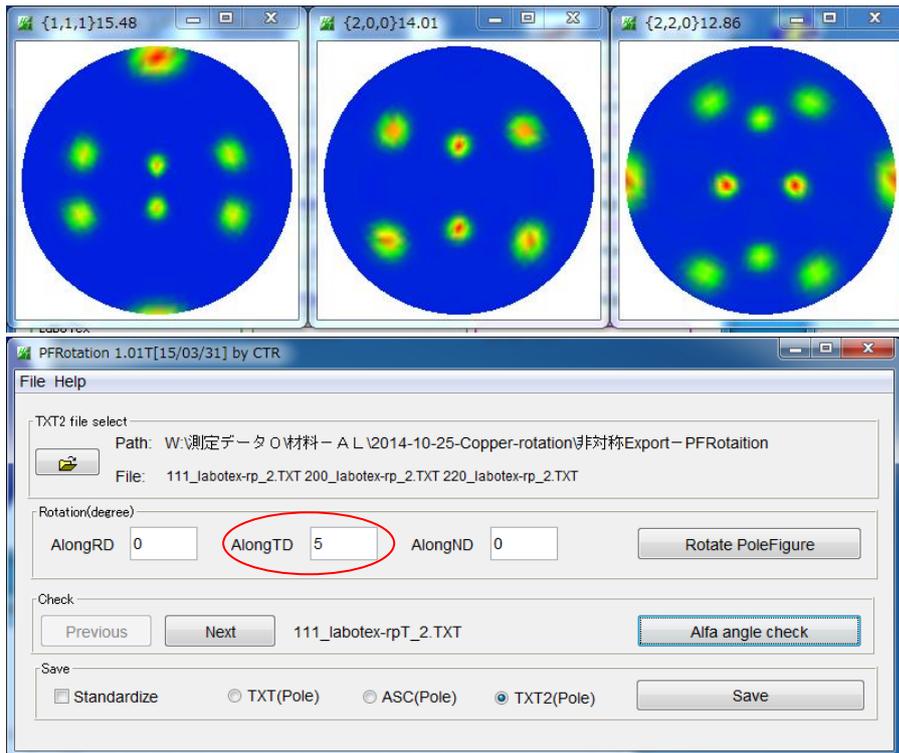
Φ の方向に伸びたODF 方位図になります。



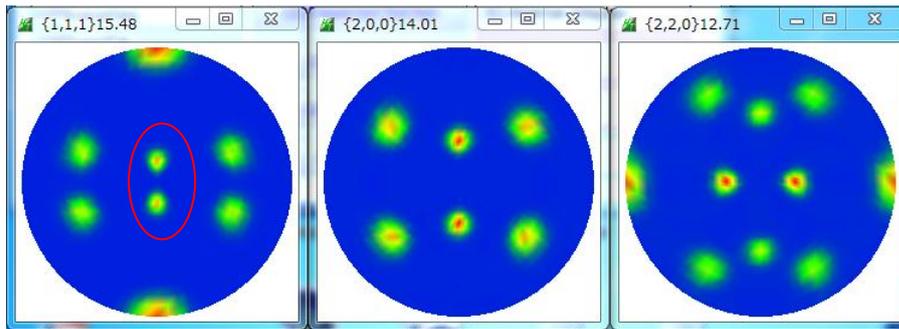
RD の方向に伸びた極点図になります。

ODF解析後の非対称極点図をExportし、PFRotationで極点図を対称極点図とした場合

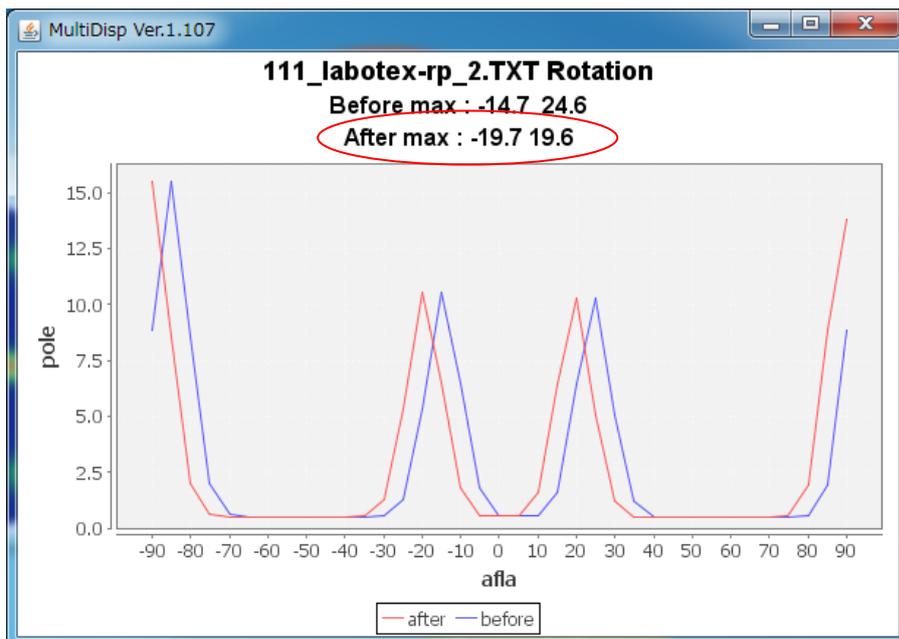
PFRotationで読み込み



TD軸5度回転



回転後の極点図



回転後のピーク位置が一致

LaTeXで読み込み

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 7 - O (cubic)

getHKL<-Filename
AllFileSelect

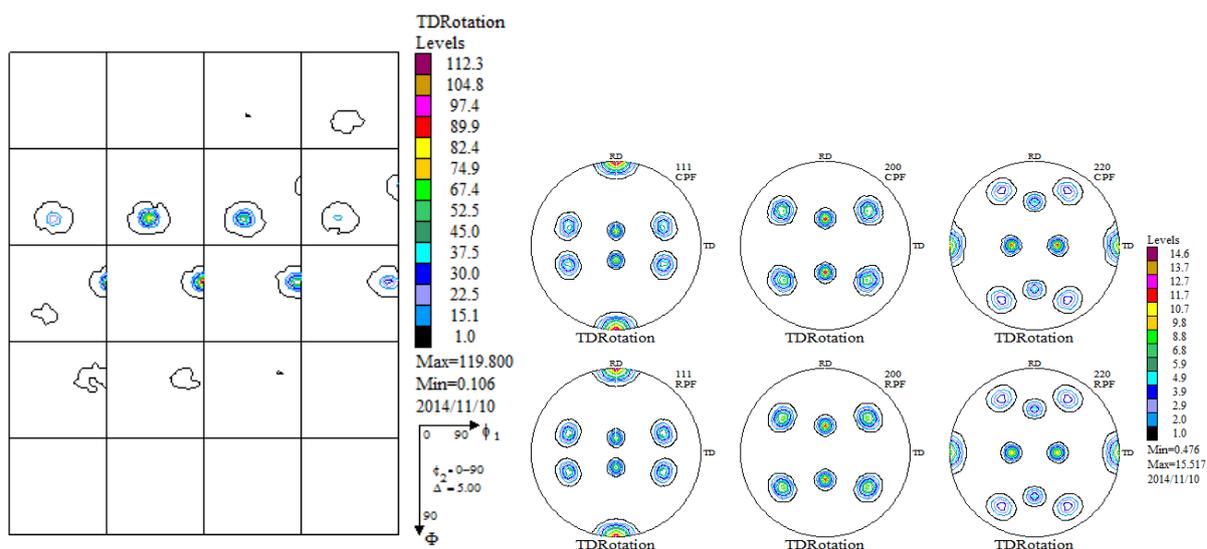
a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

PF Data

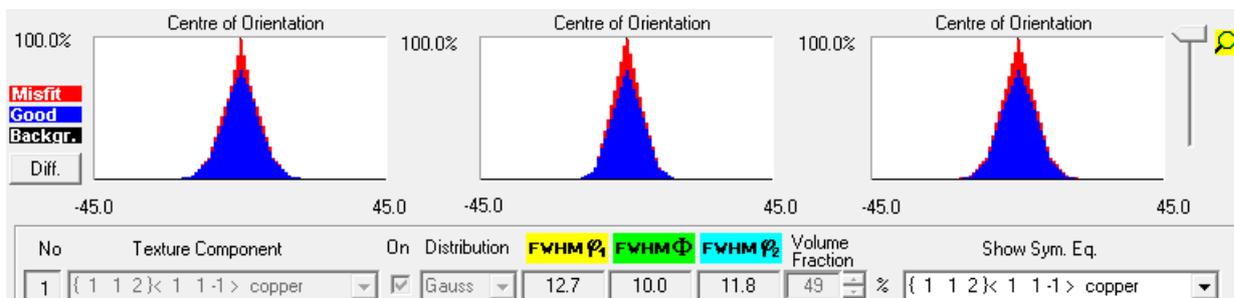
SelectFile(TXT(b.intens),TXT2(a,b.intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
111_labotex-rpT_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_labotex-rpT_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_labotex-rpT_2.TXT	2,2,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>

ODF 解析結果

入力極点図と再計算極点図

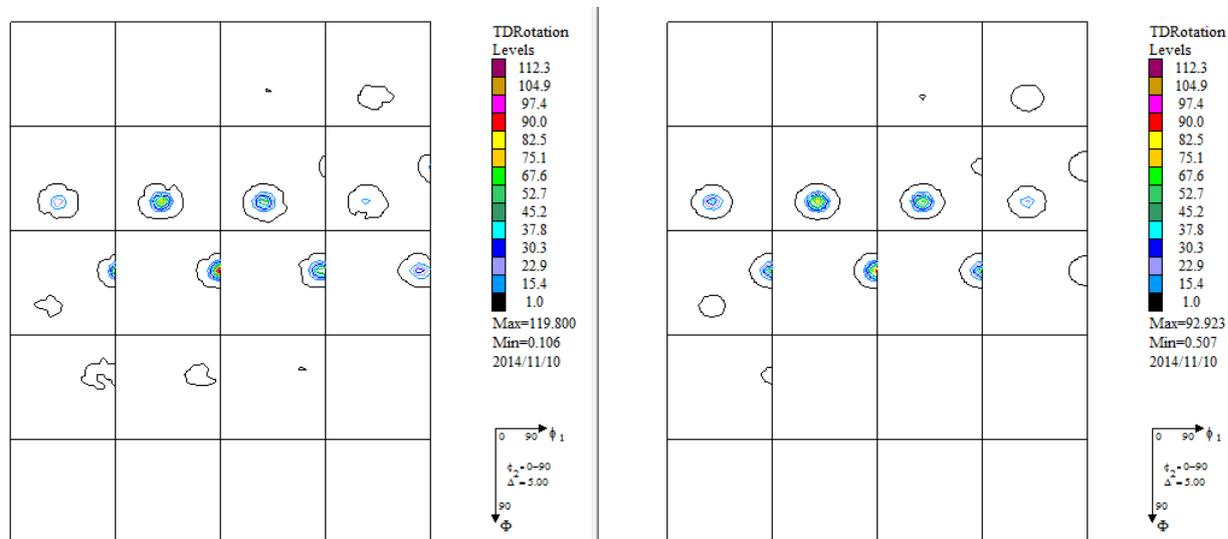


VolumeFraction



入力極点図から ODF 解析

VolumeFraction 結果から計算した ODF 図



まとめ

TD軸に対して回転した極点図を解析する場合、非対称ODF解析を行い、VolumeFractionを計算する。データベースに登録されている方位には全てのFamily登録がない為、再計算したODF図は一致しないが、再計算極点図は一致し、VolumeFractionも正確に計算されている。対称操作でVolumeFraction計算すると、再計算極点図は入力極点図と一致しないがVolumeFractionは計算出来る。