

対称反射プロファイルによる逆極点の積分逆極点とピーク逆極点

2020年09月16日

HelperTex Office

概要

材料表面の面方向極点図表示に積分強度とピーク強度表示があり、方位の広がりにより値が変わり材料の特性がどのように現れるかシミュレーションを行ってみます。

材料特性としては、ODF解析後の結晶方位分布図から計算される定量値である **VolumeFraction** である。同一 **VolumeFraction** で広がりを変えた場合の比較を行い、その後 **r a n d o m**状態のプロファイルをプロファイルの幅を変えて比較を行う。

同一 VolumeFraction で方位の広がりを変える

広がりを 10 deg とする。

Crystal Symmetry: (Cubic) | Sample Symmetry: Orthorhombic | Grid Cells for Output ODF: 5.0*5.0 | Step: 0.50 | Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 1 plots: FWHM ϕ_1 = 10.0, FWHM Φ = 10.0, FWHM ϕ_2 = 10.0

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ_1	FWHM Φ	FWHM ϕ_2	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25 %
2	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25 %
3	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25 %
4	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25 %
5	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 2 3 1 } < -3 -4 6 > S-4	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Background: 0 %

Sample Name: BCCG25-10 | Project Name: Demo

Cell Parameters (Relative): a: 1.0i, b: 1.0i, c: 1.0i | α : 90.C, β : 90.C, γ : 90.C

Buttons: Creation of Model ODF, Exit

広がりを 30 deg とする

Crystal Symmetry: (Cubic) | Sample Symmetry: Orthorhombic | Grid Cells for Output ODF: 5.0*5.0 | Step: 0.50 | Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 4 plots: FWHM ϕ_1 = 20.00, FWHM Φ = 20.00, FWHM ϕ_2 = 20.00

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ_1	FWHM Φ	FWHM ϕ_2	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	25 %
2	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	25 %
3	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	25 %
4	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	25 %
5	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 2 3 1 } < -3 -4 6 > S-4	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Background: 0 %

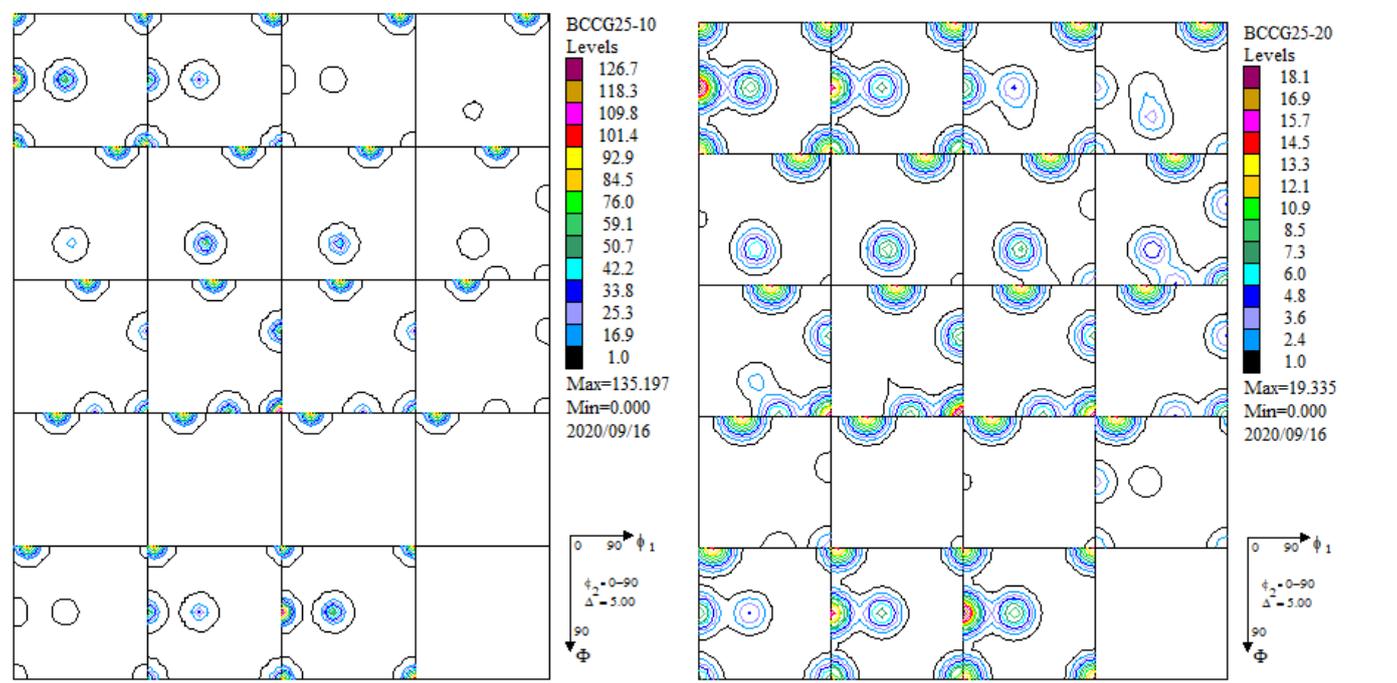
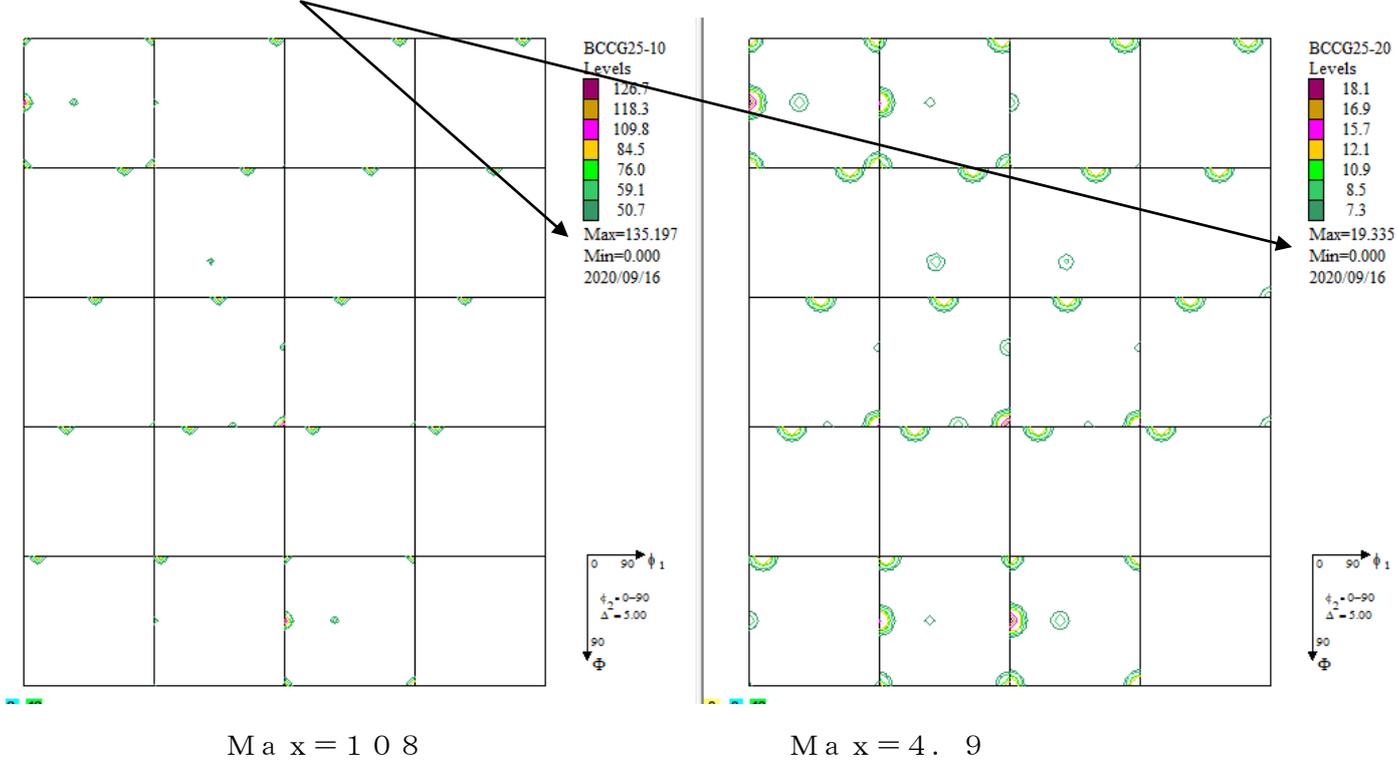
Sample Name: BCCG25-20 | Project Name: Demo

Cell Parameters (Relative): a: 1.0i, b: 1.0i, c: 1.0i | α : 90.C, β : 90.C, γ : 90.C

Buttons: Creation of Model ODF, Exit

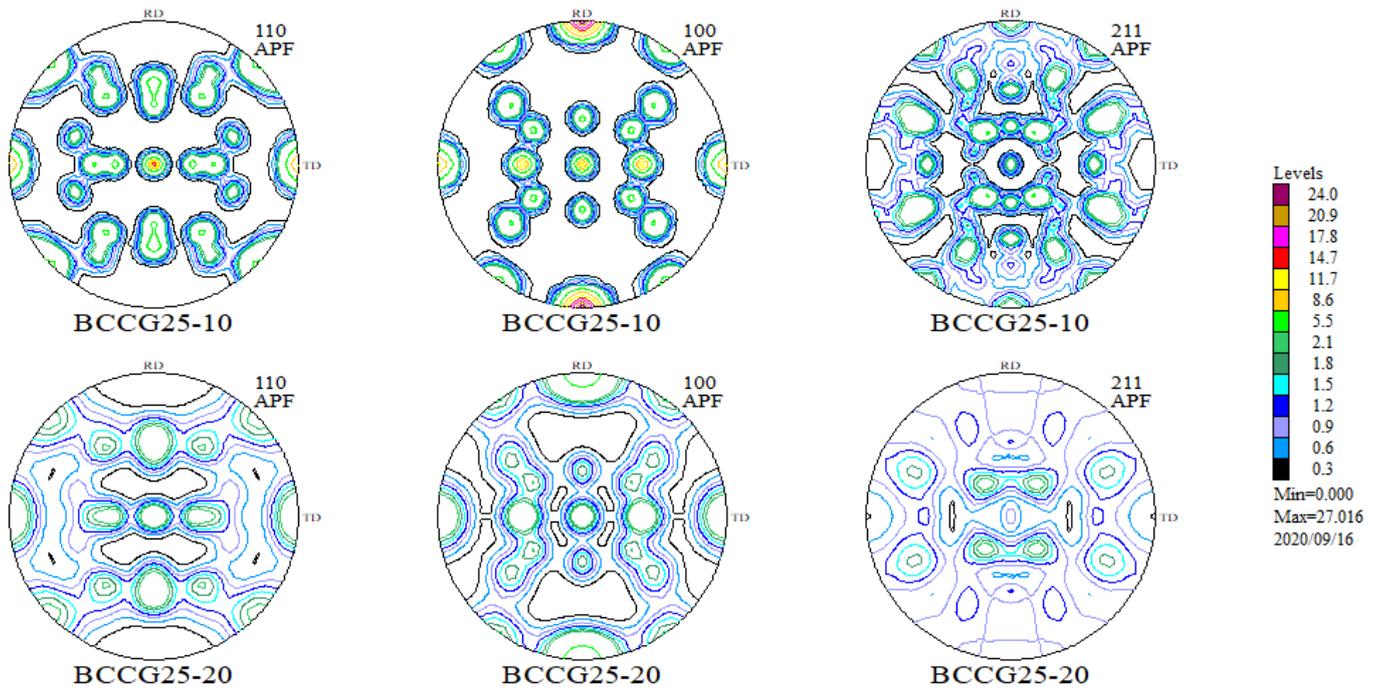
ODF 図比較

方位密度の最大値が大幅に異なります。

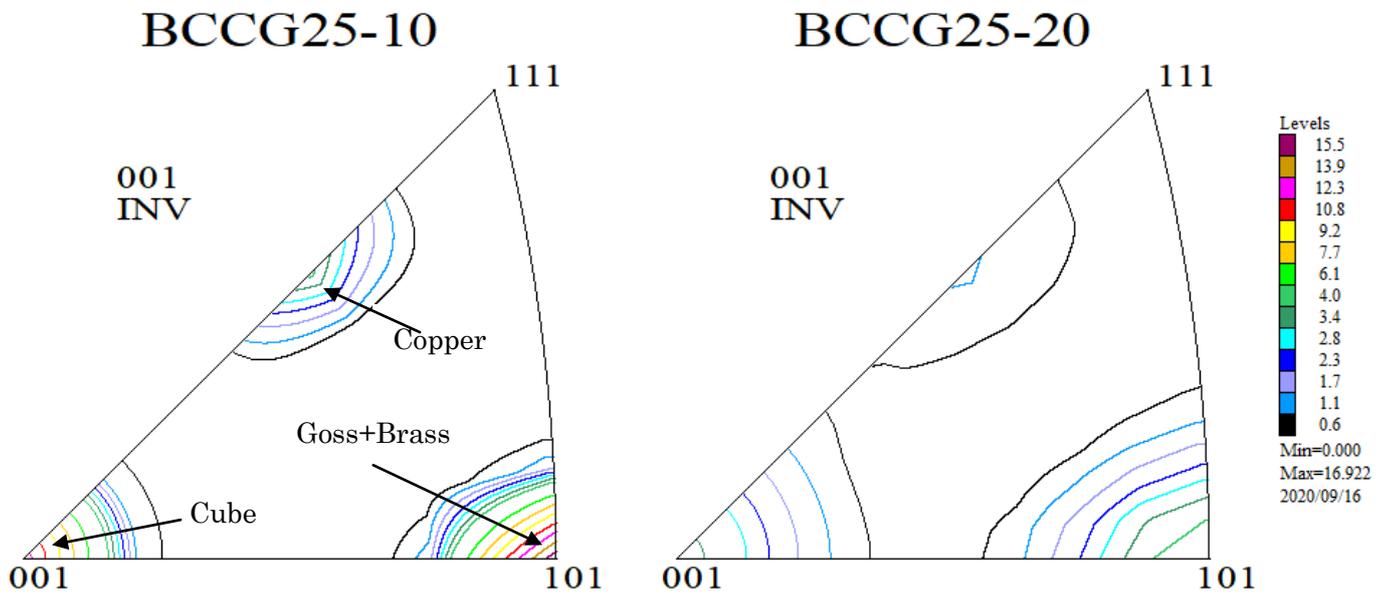


最大方位密度が異なり、方位分布が広がると最大方位密度が低下する

極点図比較



逆極点図比較



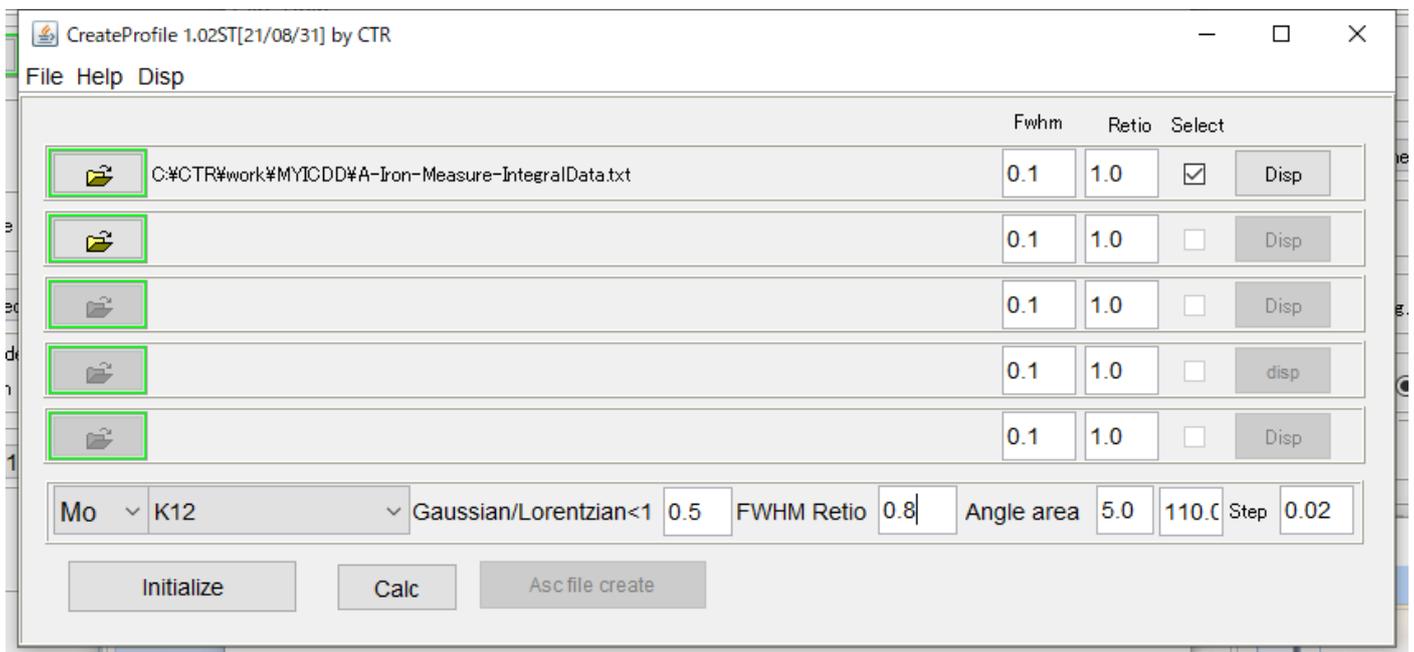
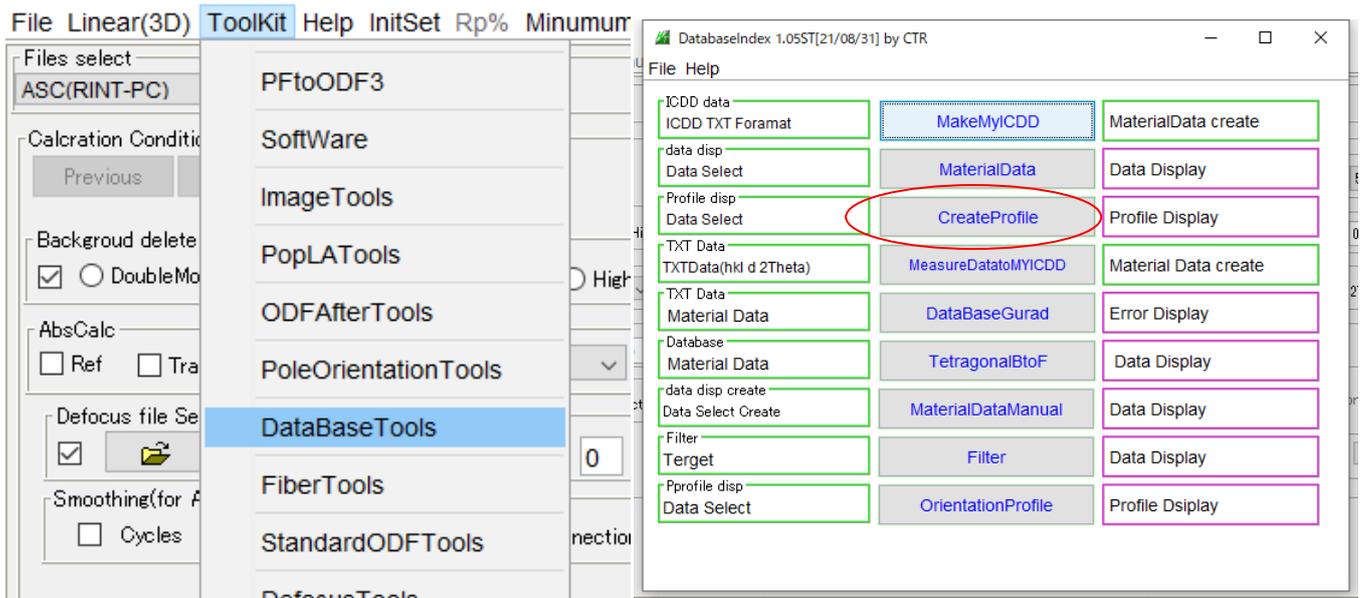
同一 VolumeFraction でも、方位の広がりが大きいと、方位密度は低下する。

Cube,Goss,Brass に対し、Copper は密度は ODF 図、極点図と同様に $1/2$ で表示されます。

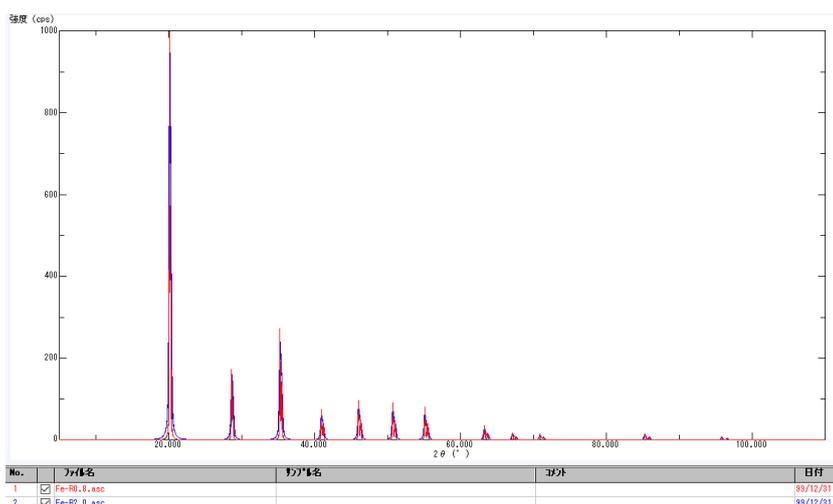
では対称反射を考えてみます。

randomプロファイルピーク強度を変えずに広がりを変えたデータを作成

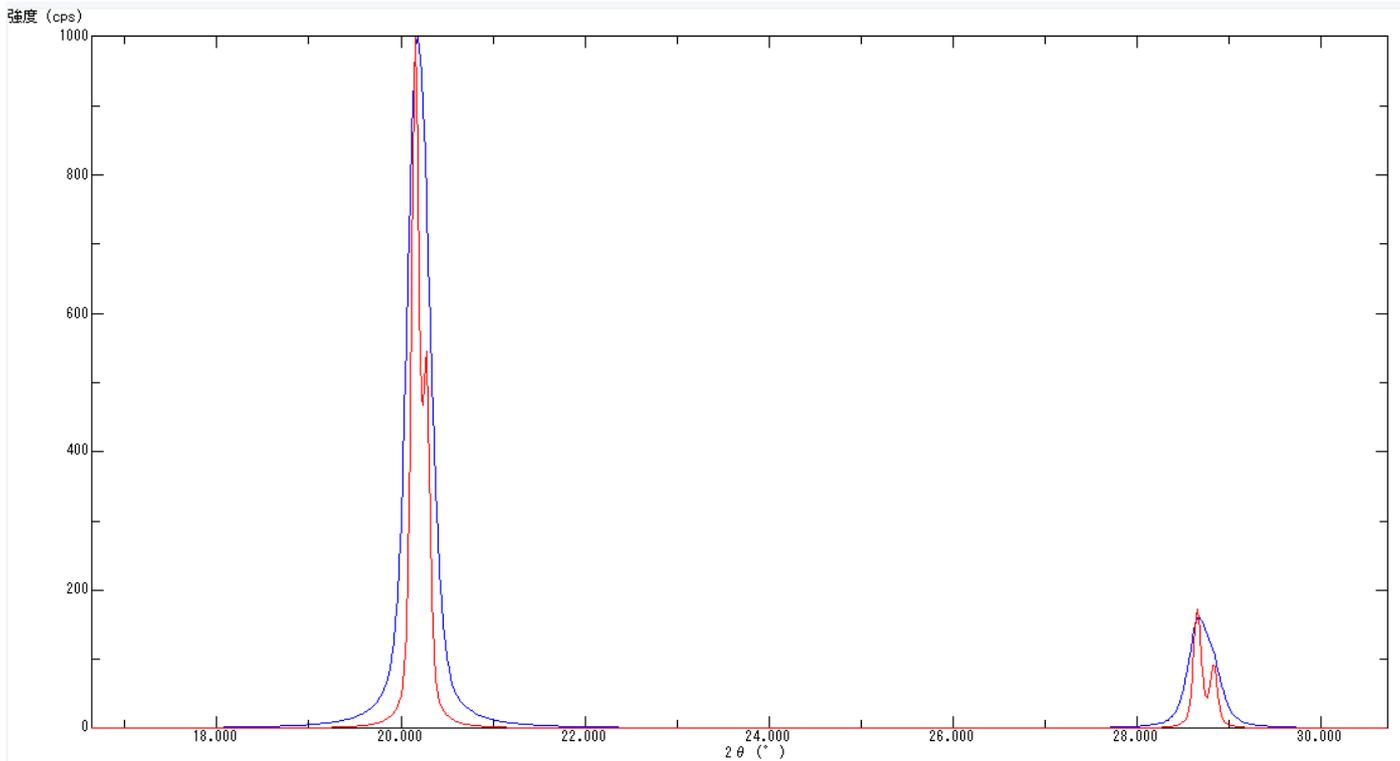
ODFPolefigure1.5 1.65T[21/08/31] by CTR



Resio を 0.8deg と 2.0deg を作成



拡大比較



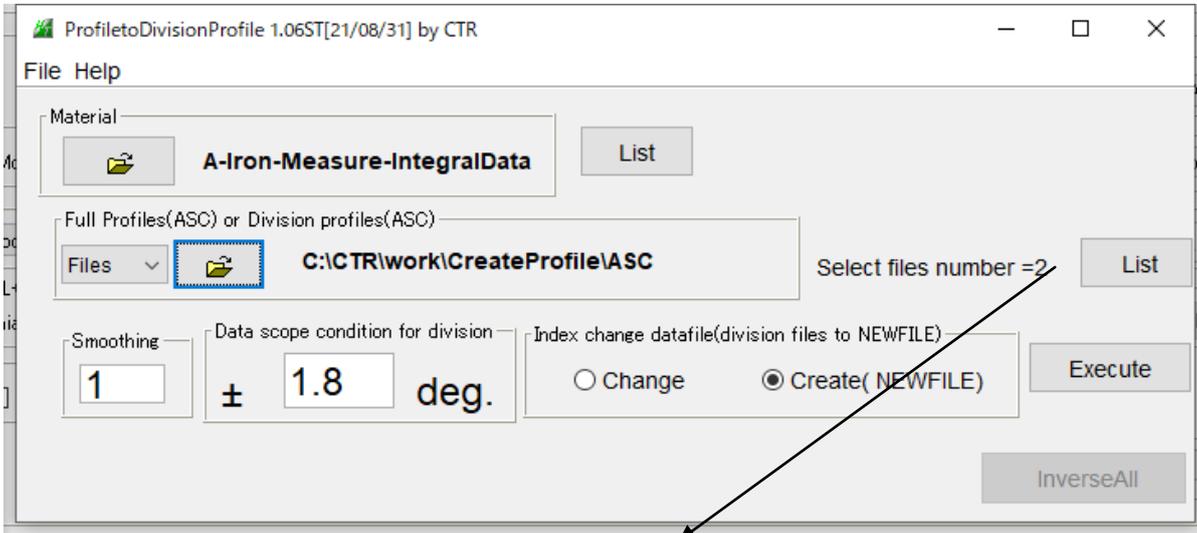
No.	ファイル名	物質名	コメント	日付
1	<input checked="" type="checkbox"/> Fe-R0.8.asc			99/12/31
2	<input checked="" type="checkbox"/> Fe-R2.0.asc			99/12/31

本来は、Resioが広がれば、ピーク強度が下がるが、プロファイル作成に機能がないため単にプロファイルの幅のみを変更して比較する。

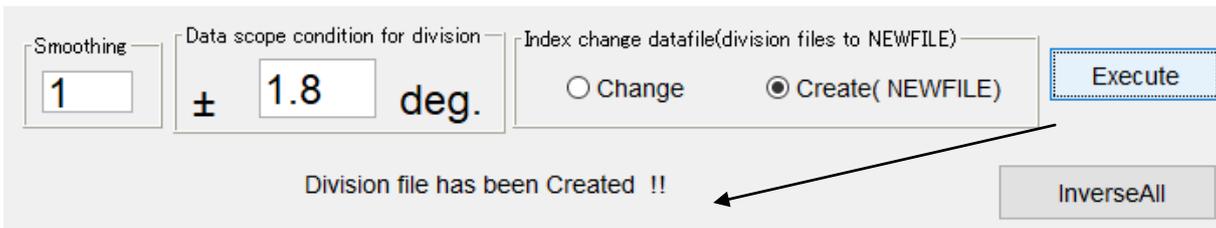
この2つの連続プロファイルを分割して逆極点の計算を行う。

The screenshot shows the ODF software interface. The main window is titled 'ODFPoleFigure2 3.96T[21/08/31] by CTR'. The 'ToolKit' menu is open, showing various tool categories. The 'InverseTools' category is selected and highlighted in blue. A sub-menu is displayed, listing various inverse calculation and display options. The option 'ProfiletoDivisionProfile' is circled in red in the original image.

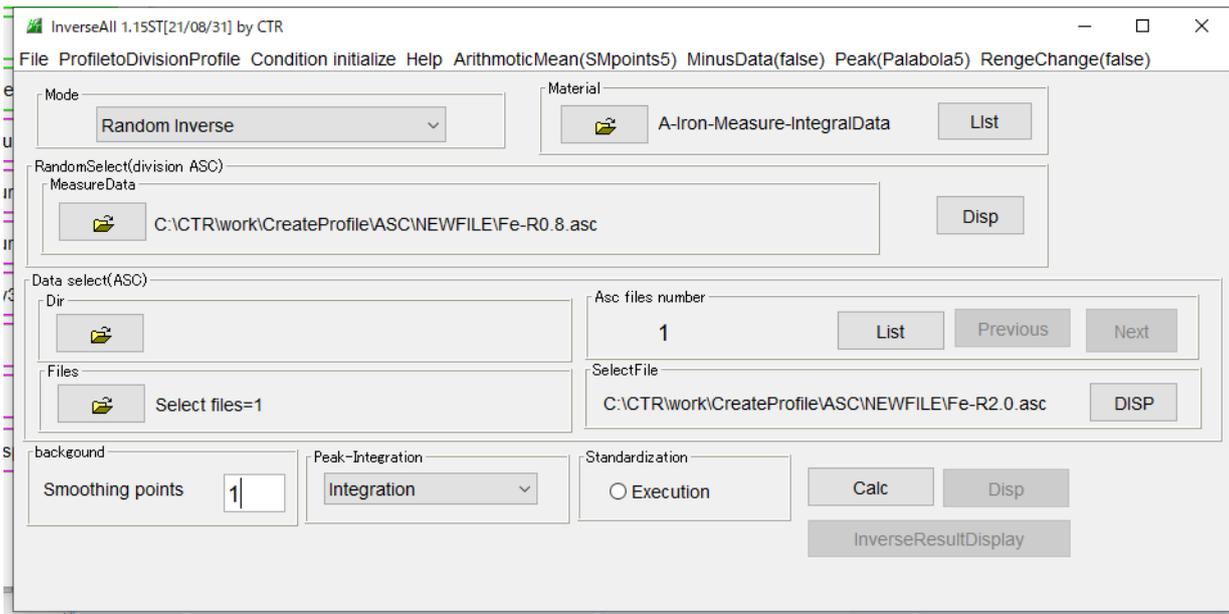
File	Help
Asc Profile (or Division)	ProfiletoDivisionProfile
Asc DivisionProfile(Index)	InverseAll
Asc HKL Intens 2Theta TEXT data	MeasureDatatoMYICDD
InverseTXT Inverse Data	InverseDisplay
InverseTXT HexalInverse Data	InverseDisplayHexa
Asc Profile	Lotgering Method
Asc(files) Profiles	Lotgering and Inverse
ODF-Inverse Inverse Data	InverseDirection
ODF-Inverse Inverse Data	GPIInverseDisplay
Inverselist Inverse Data	InverseCubicContourDisplay
Inverselist Inverse Data	InverseContourDisplay
Inverselist Inverse Data	InverseDisp2
hkllist txtdata apend	hkllistDisplay
hkllistdtDisplay listDisplay	InverseResultDisplay
ODF-Inverse Inverse Data	GPIInverseDisplay-old



C:\CTR\work\CreateProfile\ASC\Fe-R0.8.asc
C:\CTR\work\CreateProfile\ASC\Fe-R2.0.asc



InverseAll で逆極点を比較する。Random を Resio0.8 sample に Resio2.0



積分強度

Randommode ArithmeticMean(SMpoints1) BGsmpts=1 Integration Minusdata-OFF

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]	[321]	[411]	[420]	[332]	[521]	[442]
Fe-R2.0	1.972	1.949	1.972	1.94	1.963	1.962	1.956	1.948	1.905	1.936	1.955	1.948

ピーク強度

Randommode ArithmeticMean(SMpoints1) BGsmpts=1 PEAK peakPalabola5 Minusdata-OFF

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]	[321]	[411]	[420]	[332]	[521]	[442]
Fe-R2.0	1.017	0.94	0.904	0.872	0.863	0.857	0.848	0.838	0.828	0.831	0.829	0.825

積分強度は方位の広がり考慮した逆極点であり、実態を表しています。

Random に対する比率なので、Cube に対する Copper のような比率は関係ありません。