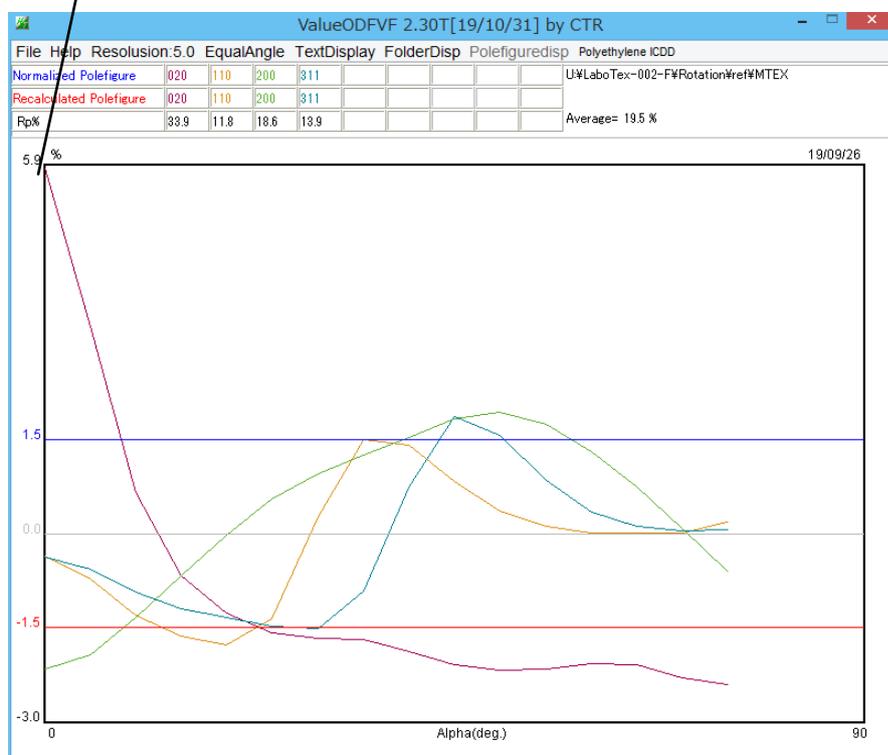
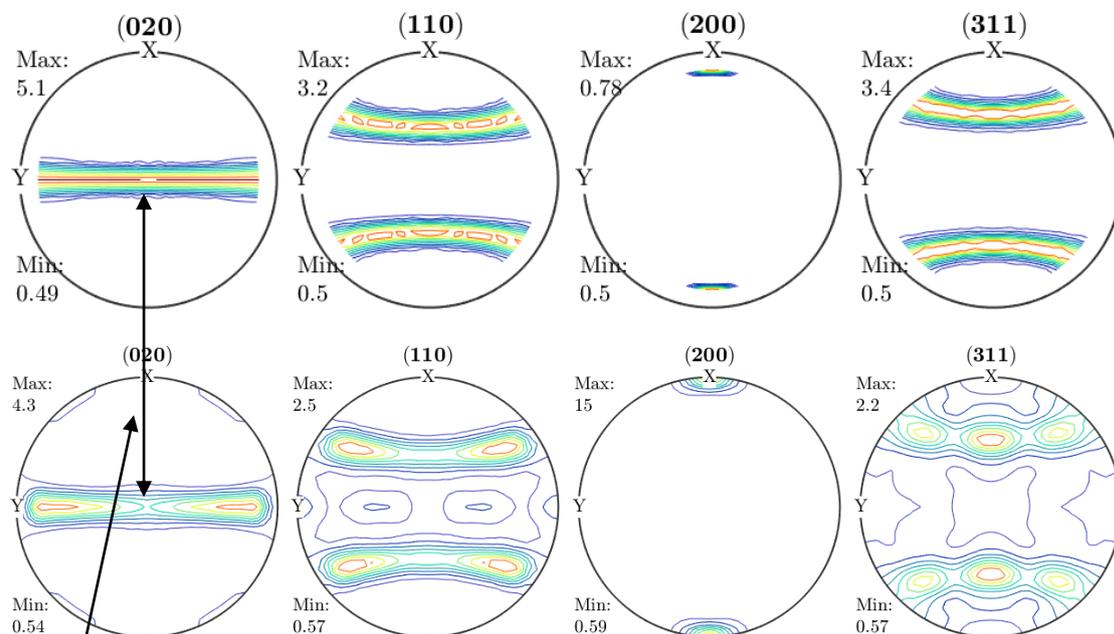


MTEXによるPolyethylene不完全極点図の解析

不完全 ($\alpha = 15 \rightarrow 90$) 極点図の軸配向が再現できない



{020}のR_p%の極点図中心で入力極点図の密度が再現できていない。

2019年09月26日

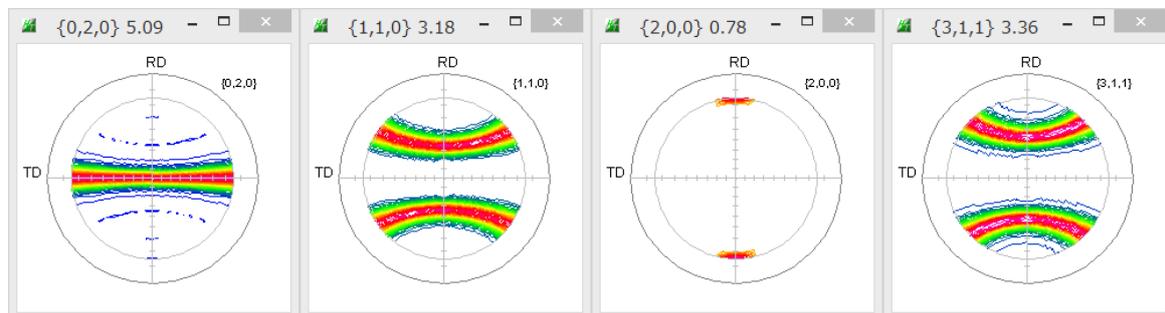
HelperTex Office

概要

MTEXでPEシリーズのPolyethyleneの解析を始めたが、結果に不安があるので纏めます。

現象は、反射極点図の軸配向解析である。

入力データは



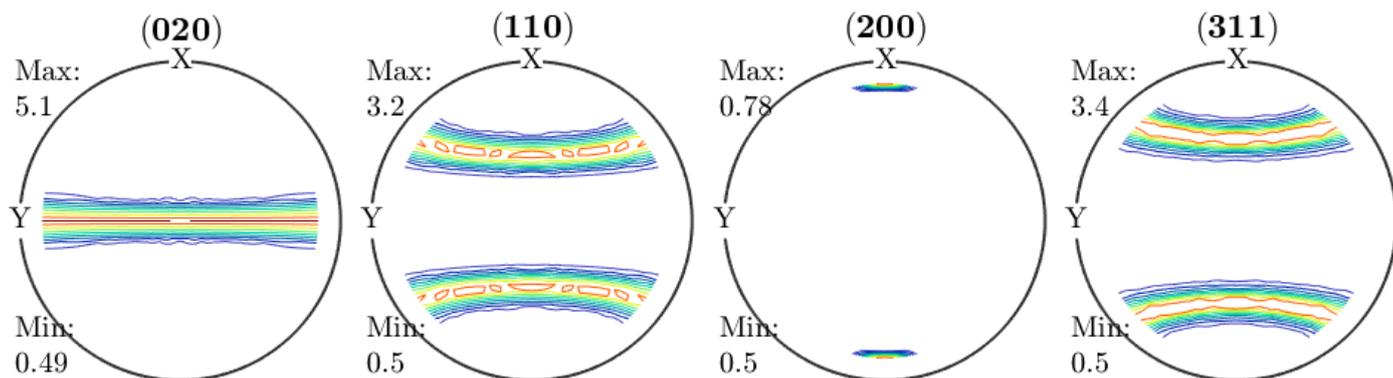
PolyethyleneのcifカードがないのでOrthorhombicの以下のカードの格子定数を変更して用いる。読み込まれた極点図指数に問題なし。

The screenshot shows the 'Import Wizard' dialog box, specifically the 'Crystal Reference Frame' section. The 'Crystal Symmetry' is set to 'Indexed'. The 'Mineral' section is set to 'Indexed' with 'IRON TETRATHIOSILICATE' as the mineral name and 'light blue' as the plotting color. The 'Crystal Coordinate System' section shows 'Point Group' as 'mmm', 'Axis Length' as a=12.407, b=7.198, c=5.812, and 'Axis Angle' as alpha=90, beta=90, gamma=90. The 'Plot' button is visible at the bottom left, and navigation buttons '<< Previous', 'Next >>', and 'Finish' are at the bottom right.

変更

The screenshot shows the 'Import Wizard' dialog box, specifically the 'Crystal Reference Frame' section. The 'Crystal Symmetry' is set to 'Indexed'. The 'Mineral' section is set to 'Indexed' with 'IRON TETRATHIOSILICATE' as the mineral name and 'light blue' as the plotting color. The 'Crystal Coordinate System' section shows 'Point Group' as 'mmm', 'Axis Length' as a=7.4, b=4.93, c=2.54, and 'Axis Angle' as alpha=90, beta=90, gamma=90. The 'Plot' button is visible at the bottom left, and navigation buttons '<< Previous', 'Next >>', and 'Finish' are at the bottom right.

読み込まれた不完全極点図



ODF 計算

```
>> odf=calcODF(pf)
0 | 0.88 0.63 0.06 0.67
1 | 0.43 0.53 0.19 0.62
2 | 0.30 0.45 0.23 0.56
3 | 0.29 0.33 0.32 0.44
4 | 0.16 0.26 0.36 0.39
5 | 0.19 0.18 0.40 0.29
6 | 0.10 0.15 0.41 0.26
7 | 0.12 0.12 0.41 0.21
8 | 0.08 0.11 0.41 0.19
I'm going to apply ghost correction. Uniform portion fixed to 0.47
0 | 1.07 0.83 0.15 0.87
1 | 0.61 0.77 0.19 0.84
2 | 0.42 0.70 0.24 0.81
3 | 0.30 0.61 0.34 0.75
4 | 0.30 0.51 0.44 0.69
5 | 0.25 0.47 0.46 0.64
6 | 0.22 0.40 0.52 0.60
```

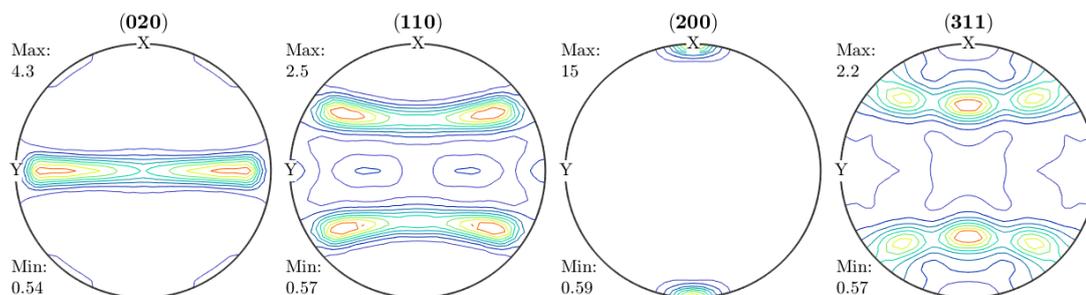
```
odf = ODF (show methods, plot)
crystal symmetry : IRON TETRATHIOSILICATE (mmm)
specimen symmetry : 1

Uniform portion:
weight : 0.47453

Radially symmetric portion:
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°
center: 29760 orientations, resolution: 5°
weight: 0.52547
```

R p %が異常に大きな値になる。

計算された再計算極点図

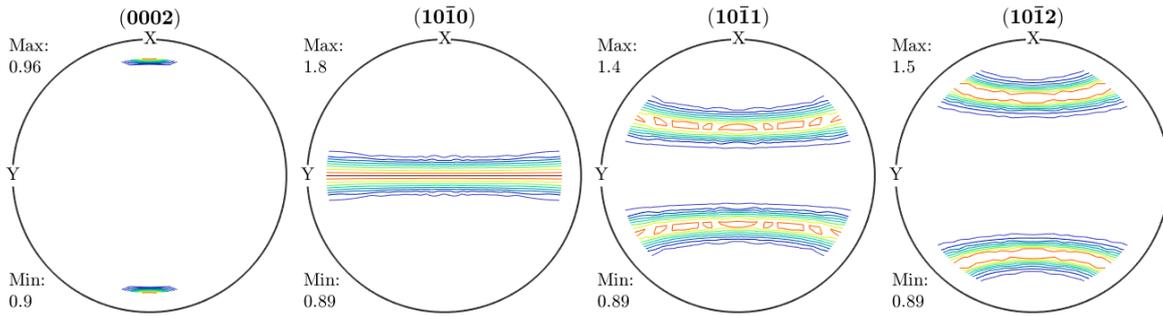


軸配向が再現出来ていない。

Orthorombicの問題?????

Tiの軸配向で評価

入力極点図



ODF計算

```

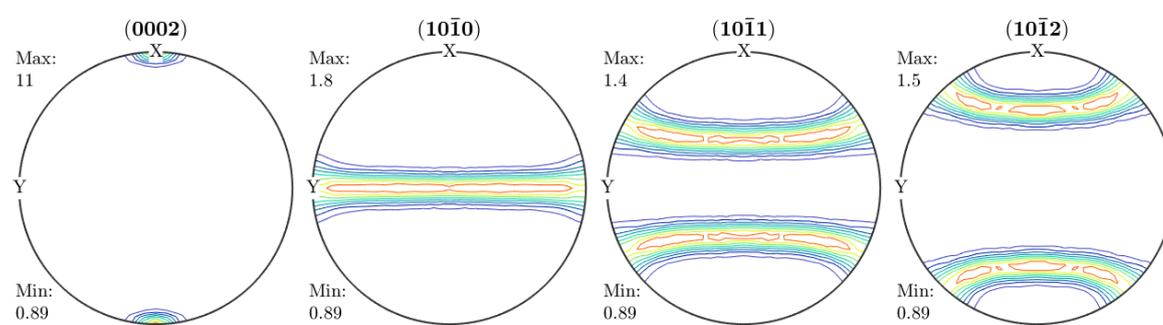
>> odf=calcODF(pf)
0 | 0.01 0.25 0.16 0.19
1 | 0.13 0.13 0.12 0.14
2 | 0.09 0.10 0.09 0.10
3 | 0.07 0.07 0.07 0.08
4 | 0.06 0.05 0.05 0.06
5 | 0.04 0.05 0.04 0.05
6 | 0.04 0.04 0.03 0.04
7 | 0.03 0.03 0.03 0.04
8 | 0.03 0.03 0.03 0.03
9 | 0.02 0.03 0.03 0.03
10 | 0.02 0.02 0.02 0.03
I'm going to apply ghost correction. Uniform portion fixed to 0.89
0 | 0.31 1.06 0.81 0.86
1 | 0.28 0.79 0.77 0.81
2 | 0.49 0.55 0.63 0.68
3 | 0.76 0.38 0.48 0.51
4 | 0.96 0.26 0.34 0.37
5 | 1.05 0.17 0.23 0.24
6 | 0.94 0.12 0.14 0.14
7 | 0.74 0.08 0.08 0.08
8 | 0.69 0.07 0.06 0.06
9 | 0.69 0.06 0.06 0.06

odf = ODF (show methods, plot)
crystal symmetry : Titanium (6/mmm, X||a*, Y||b, Z||c)
specimen symmetry: 1

Uniform portion:
weight: 0.88599

Radially symmetric portion:
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°
center: 9863 orientations, resolution: 5°
weight: 0.11401
    
```

計算された再計算極点図



Hexagonalの軸配向は正常に解析できている。