

MTEXによるS方位のVolume Fraction計算

2025年04月02日

HelperTex Office

概要

加工材料の特性を知るため、方位の定量は重要である。

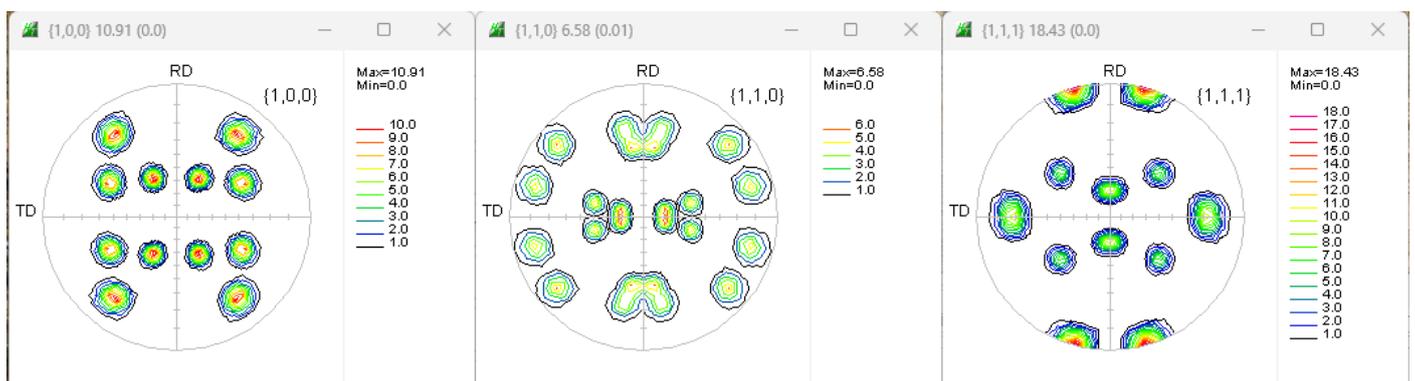
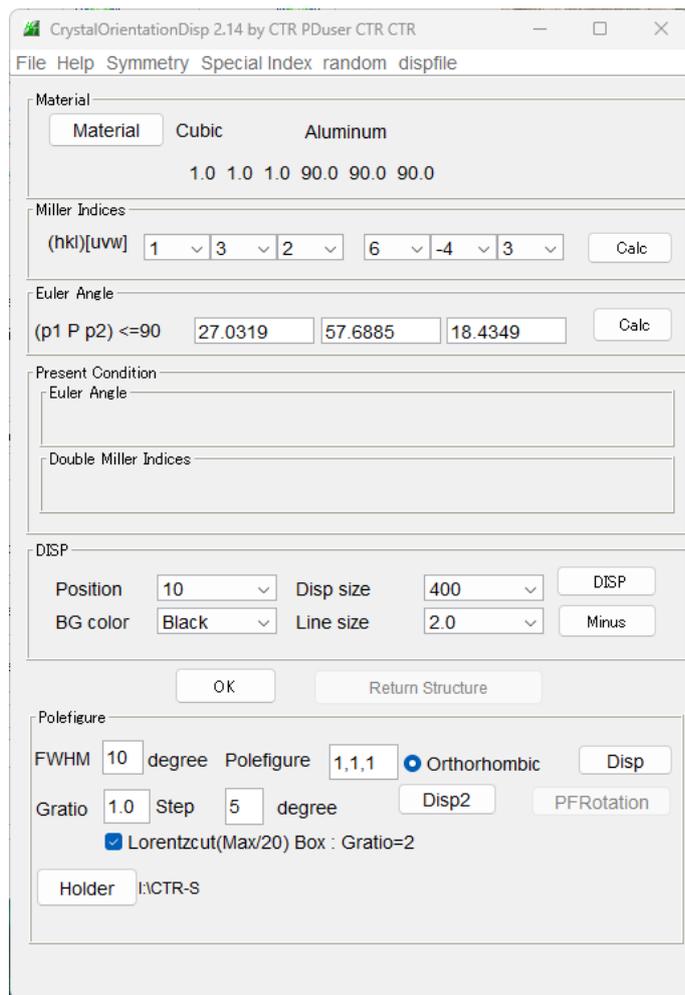
極点図からODF解析を行い、体積分率 (Volume Fraction (VF%)) 計算が各種ODFソフトウェアで行われているが、MTEXは特殊である。

S方位は $(1\ 3\ 2)$ $[6\ -4\ 3]$, $(2\ 3\ 1)$ $[3\ -4\ 6]$, $(2\ 1\ 3)$ $[-3\ -6\ 4]$, $(2\ 3\ 1)$ $[-3\ 4\ -6]$ であるが、通常、Volume Fraction解析でTriclinicでもS方位1本指定で全体のVolume Fractionを計算するが、MTEXでは対称性により4:2:1のVF%が計算される。このため、Orthorhombic指定を勧めます。

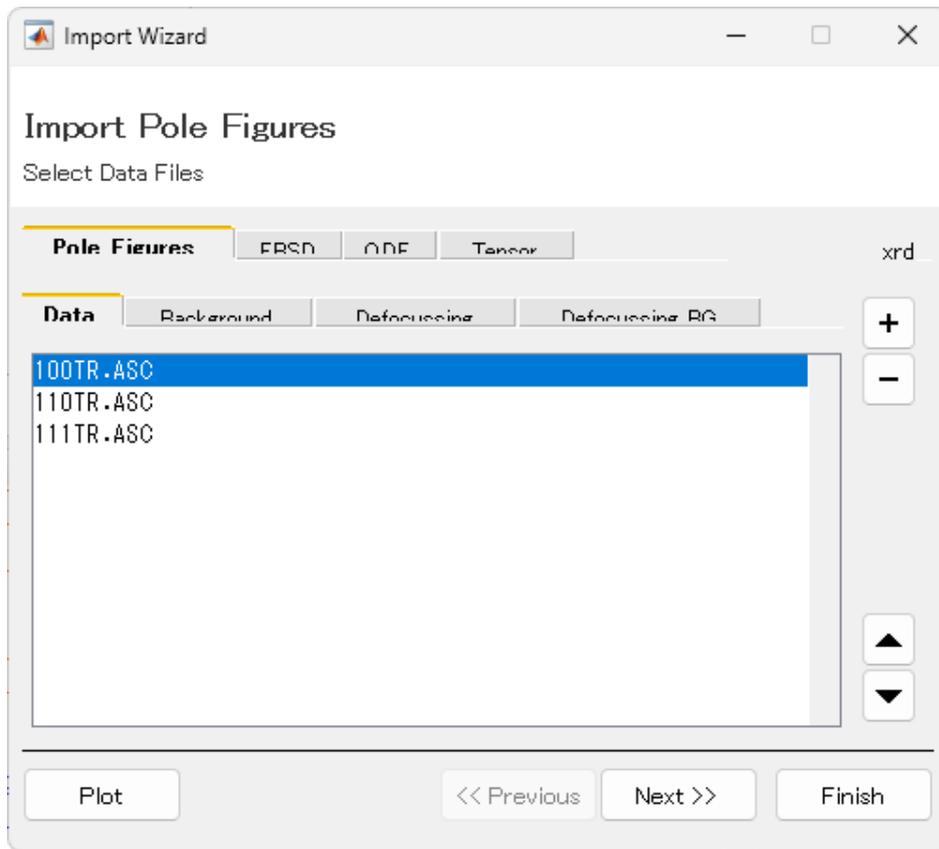
Orthorhombicでは対称性を考慮したVF%が計算される。

CTRソフトウェアで極点図 $\{1\ 0\ 0\}$ 、 $\{1\ 1\ 0\}$ 、 $\{1\ 1\ 1\}$ を作成し、MTEXで解析最初にTriclinic、次にOrthorhombicで解析を行う。

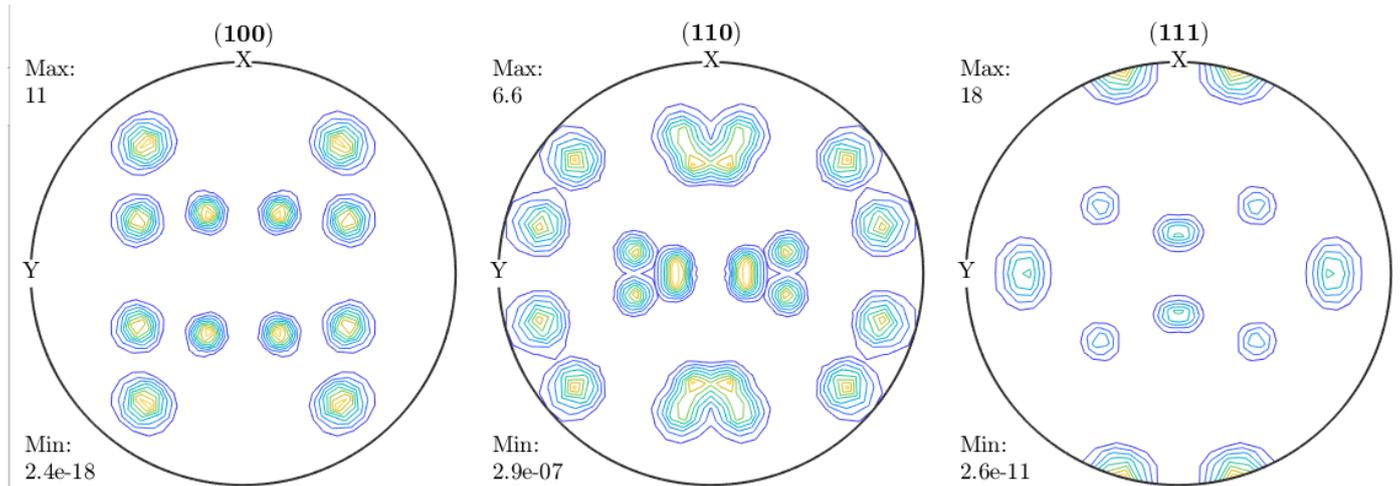
極点図の生成



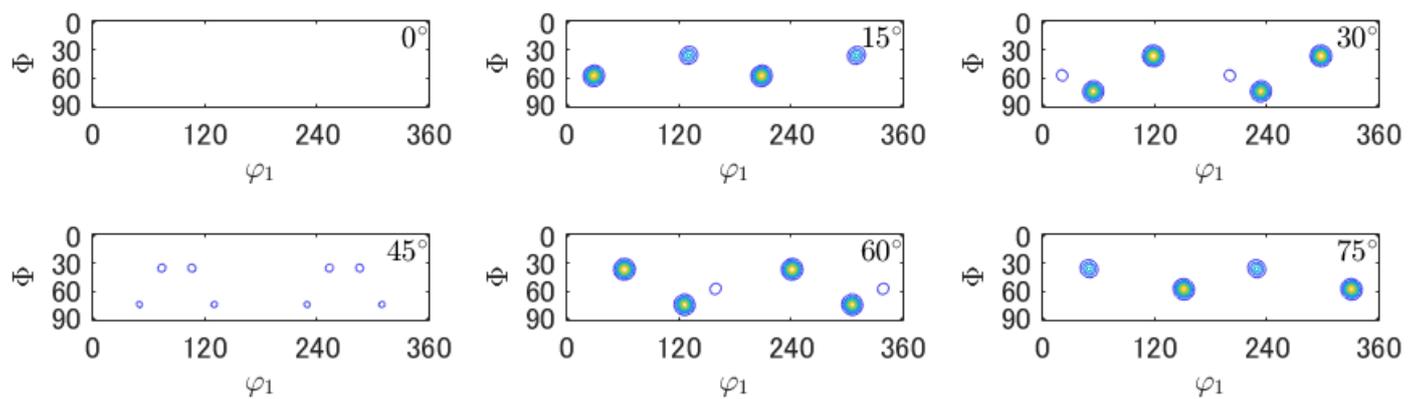
MT EXに読み込む



```
>> plot(pf,'contour','projection','eangle')
```



```
>> odf=calcODF(pf)
```



TriclinicでVolumeFraction計算

```
>> [value,ori]=max(odf,'numLocal',6)
```

progress: 100%

value = 59.7539 59.7522 59.3696 59.3607 9.1131 0.3352

ori = orientation (Aluminum -> xyz)

size: 1 x 6

Bunge Euler angles in degree

phi1	Phi	phi2	Inv.
58.6023	36.6043	333.523	0
121.497	36.5846	206.352	0
238.658	36.6247	153.619	0
301.501	36.6064	26.3356	0
74.491	30.7637	318.827	0
180.363	20.8378	134.721	0

方位を得る

The screenshot shows the MTEXeulertoHKL software window. The 'MTEX-eulerfile' section contains a file named 'I:\CTR-S\MTEX\Bunge_Euler_angles_in_degree.txt'. The main display area shows a table of Euler angles and their corresponding orientations. The table is as follows:

phi1	Phi	phi2	Inv.	Orientation
58.6023	36.6043	333.523	0	(-1 2 3)[6 -3 4]
121.497	36.5846	206.352	0	(-1 -2 3)[6 3 4]
238.658	36.6247	153.619	0	(1 -2 3)[6 -3 -4]
301.501	36.6064	26.3356	0	(1 2 3)[6 3 -4]
74.491	30.7637	318.827	0	(-1 1 3)[2 -1 1]
180.363	20.8378	134.721	0	(4 -4 15)[1 1 0]

Below the table, the software shows the calculation of orientation and volume fraction for each orientation:

```
ori0=orientation.byMiller([-1 2 3],[6 -3 4],CS,SS)
volume(odf,ori0,15*degree)
ori1=orientation.byMiller([-1 -2 3],[6 3 4],CS,SS)
volume(odf,ori1,15*degree)
ori2=orientation.byMiller([1 -2 3],[6 -3 -4],CS,SS)
volume(odf,ori2,15*degree)
ori3=orientation.byMiller([1 2 3],[6 3 -4],CS,SS)
volume(odf,ori3,15*degree)
ori4=orientation.byMiller([-1 1 3],[2 -1 1],CS,SS)
volume(odf,ori4,15*degree)
```

At the bottom, there is a 'Calc' button and a field for 'angle : 15'.

S方位を確認する。

V o l u m e F r a c t i o n 計算

```
>> ori0=orientation.byMiller([-1 2 3],[6 -3 4],CS,SS)
volume(odf,ori0,15*degree)
ori1=orientation.byMiller([-1 -2 3],[6 3 4],CS,SS)
volume(odf,ori1,15*degree)
ori2=orientation.byMiller([1 -2 3],[6 -3 -4],CS,SS)
volume(odf,ori2,15*degree)
ori3=orientation.byMiller([1 2 3],[6 3 -4],CS,SS)
volume(odf,ori3,15*degree)
```

```
ori0 = orientation (Aluminum -> xyz)
```

```
  Bunge Euler angles in degree
```

```
  phi1    Phi   phi2   Inv.
```

```
 238.98 36.6992 333.435     0
```

```
ans = 0.2260
```

```
ori1 = orientation (Aluminum -> xyz)
```

```
  Bunge Euler angles in degree
```

```
  phi1    Phi   phi2   Inv.
```

```
 121.02 36.6992 206.565     0
```

```
ans = 0.2269
```

```
ori2 = orientation (Aluminum -> xyz)
```

```
  Bunge Euler angles in degree
```

```
  phi1    Phi   phi2   Inv.
```

```
 58.9799 36.6992 153.435     0
```

```
ans = 0.2269
```

```
ori3 = orientation (Aluminum -> xyz)
```

```
  Bunge Euler angles in degree
```

```
  phi1    Phi   phi2   Inv.
```

```
 121.02 36.6992 26.5651     0
```

```
ans = 0.2269
```

v a l u e の結果では方位密度が

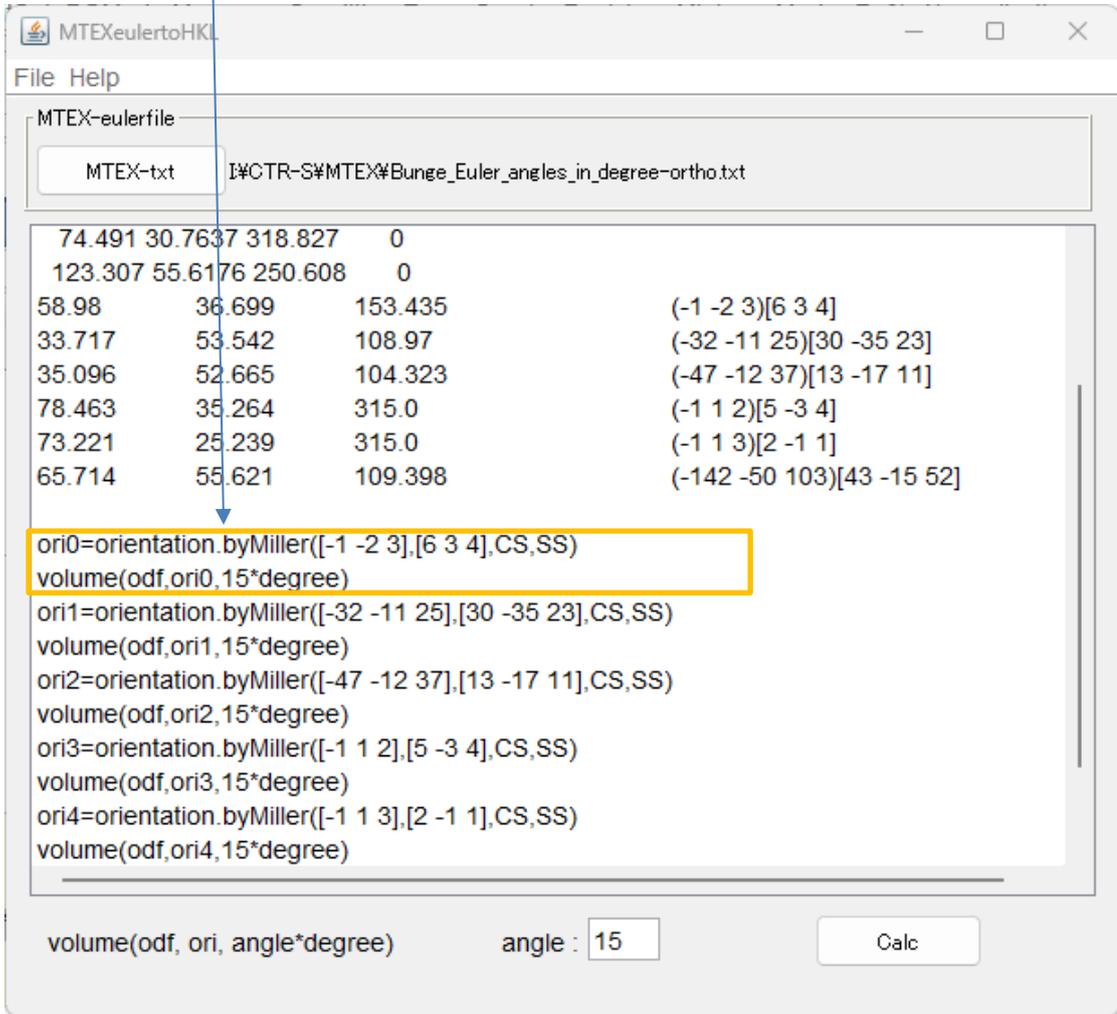
```
value = 59.7539 59.7522 59.3696 59.3607 9.1131 0.3352
```

```
T o t a l = 0. 9 0 7 6 ( 9 0. 7 6 %)
```

この方法は実試料では無理がある。

OrthorhombicでVolumeFraction計算

```
>> SS = specimenSymmetry('orthorhombic')
>> pf = PoleFigure.load(fname,h,CS,SS,'interface','xrd')
>> odf=calcODF(pf)
>> [value,ori]=max(odf,'numLocal',6)
value = 64.0962 36.1868 24.5402 8.9308 9.2960 0.2792
ori = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
size: 1 x 6
Bunge Euler angles in degree
  phi1    Phi    phi2    Inv.
121.181 36.5843 206.618    0
149.798 53.5136 251.081    0
146.455 52.6741 255.665    0
76.7706 36.0198 317.236    0
 74.491 30.7637 318.827    0
123.307 55.6176 250.608    0
```



V o l u m e F r a c t i o n 計算

```
>> ori0=orientation.byMiller([-1 -2 3],[6 3 4],CS,SS)
```

```
volume(odf,ori0,15*degree)
```

```
ori0 = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
```

```
Bunge Euler angles in degree
```

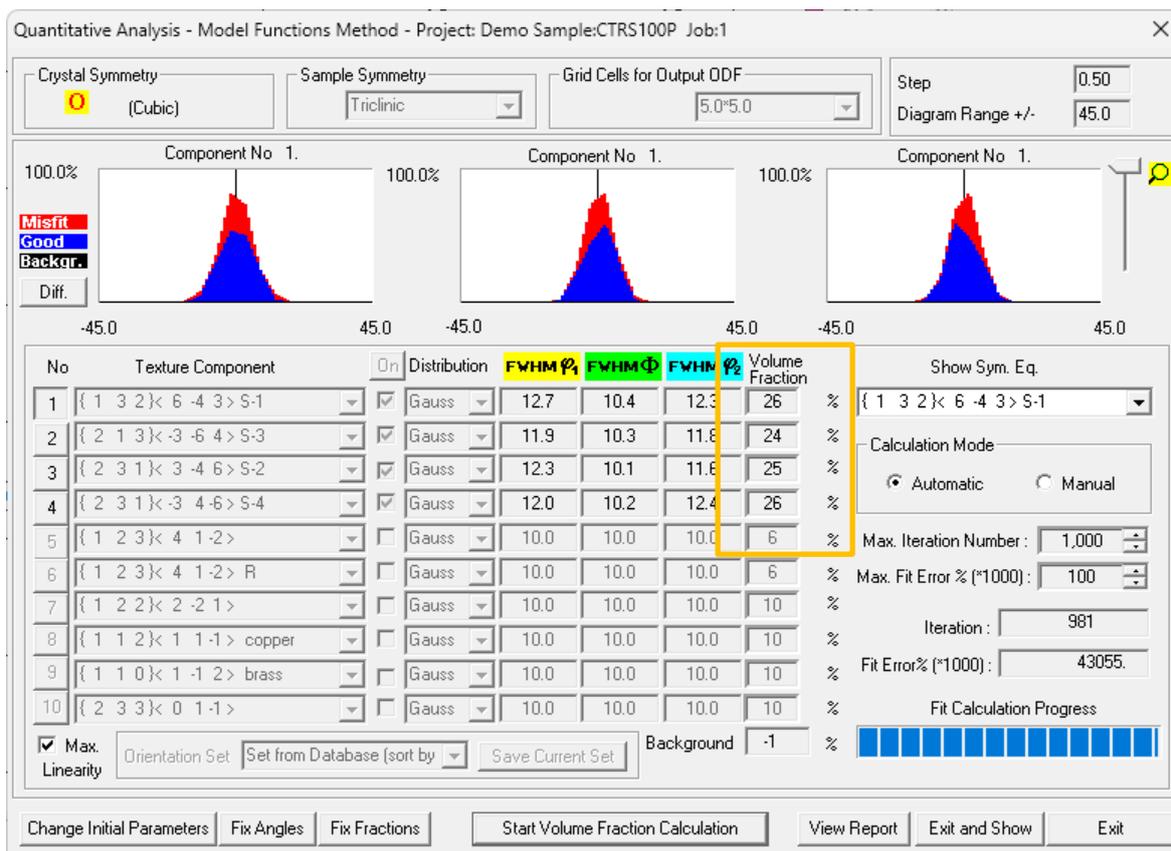
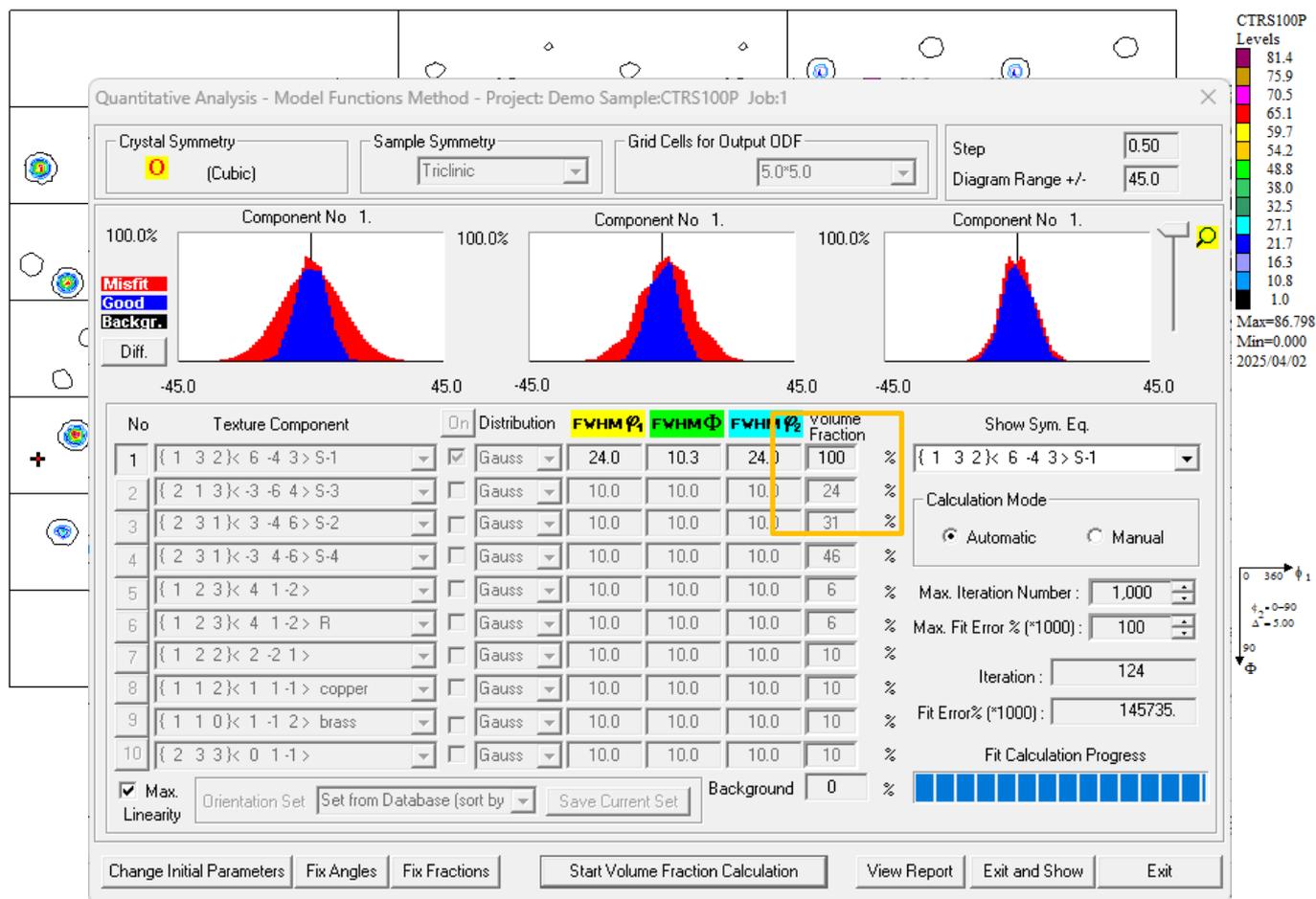
phi1	Phi	phi2	Inv.
121.02	36.6992	206.565	0

```
progress: 100%
```

```
ans = 0.9175
```

91.75%を得る。

S方位を確認する。



S1のみでも100%が得られるのが一般的、複数指定した場合、合計する。

TexToolsで解析
Triclinicの場合



Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

S component

$\phi 1$ 58.98 Φ 36.7 $\phi 2$ 63.43

Tolerance (degree) 15

With sample symmetrical orientations (4 fold)

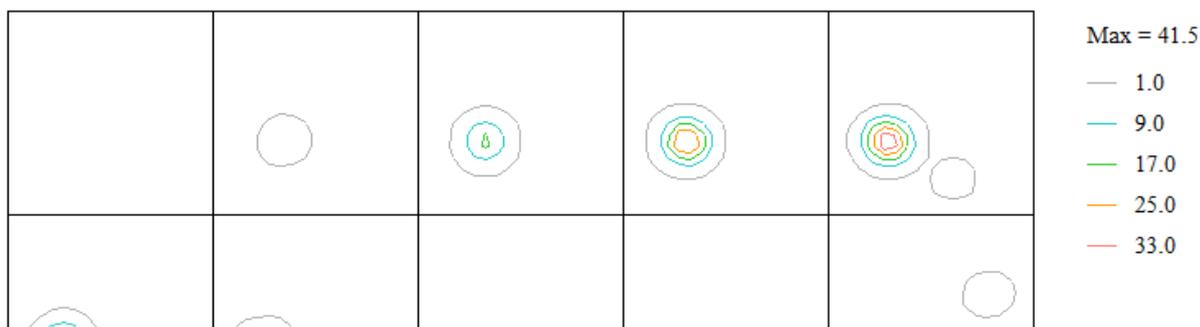
ODF File Name I:\CTR-S\TexTools\triclinic.HODF >>

Result: S=89.85%

Calculate

Cancel

Orthorhombicの場合



Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

S component

$\phi 1$ 58.98 Φ 36.7 $\phi 2$ 63.43

Tolerance (degree) 15

With sample symmetrical orientations (4 fold)

ODF File Name I:\CTR-S\TexTools\Orthorhombic.HODF >>

Result: S=89.85%

Calculate

Cancel

Triclinic, Orthorhombic 双方共、89.85%を得る。
TexToolsの場合、複数の概念がない。