

MTEXによるTitaniumの方位密度とUnimodal () 関数

2019年07月02日

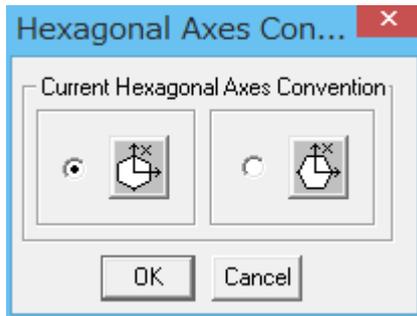
HelperTex Office

概要

Hexagonalに対するMTExの動作を確認する。

MTEx 5. 1. 1で動作確認を行った。

HexagonalはX軸の設定が2種類ある。



以下のチェックでは、XRD解析時は右のB-Typeであるが、Create時はA-Typeで作成されている。

又、5. 1. 1で動作していたOrientation()が5. 2. 2では動作しない。

```
>> CS = crystalSymmetry('6/mmm', [2.95 2.95 4.886], 'X||a*', 'Y||b', 'Z||c*', 'mineral', 'Titanium', 'color', 'light blue');
SS = specimenSymmetry('1');
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree);
>> ori = orientation('Miller',[0,0,1],[2,1,0],CS,SS);
'normalize' を使用するには、次の製品のライセンスを取得し、インストールして有効化していなければなりません:
  DSP System Toolbox
```

エラー: **orientation.byMiller** (line 40)

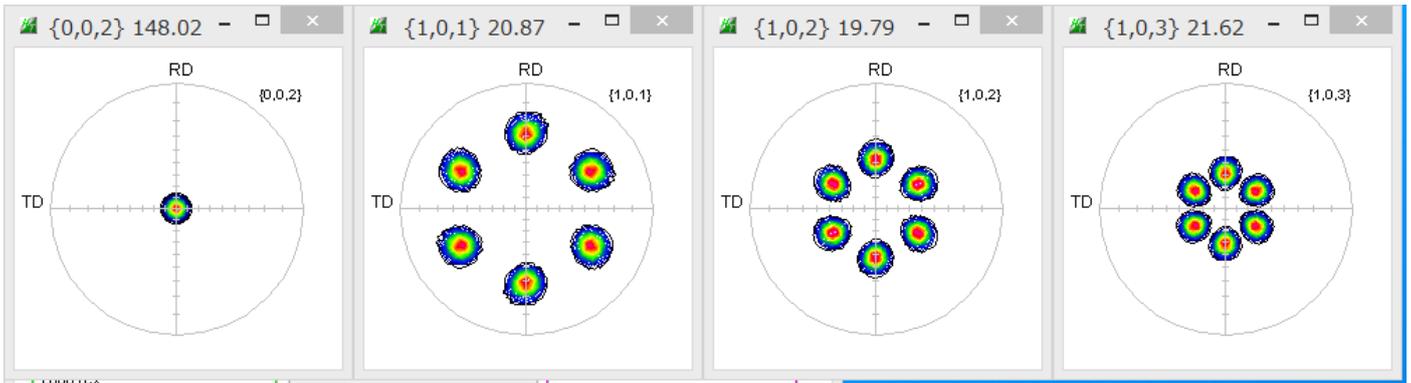
```
hkl = normalize(hkl);
```

エラー: **orientation** (line 93)

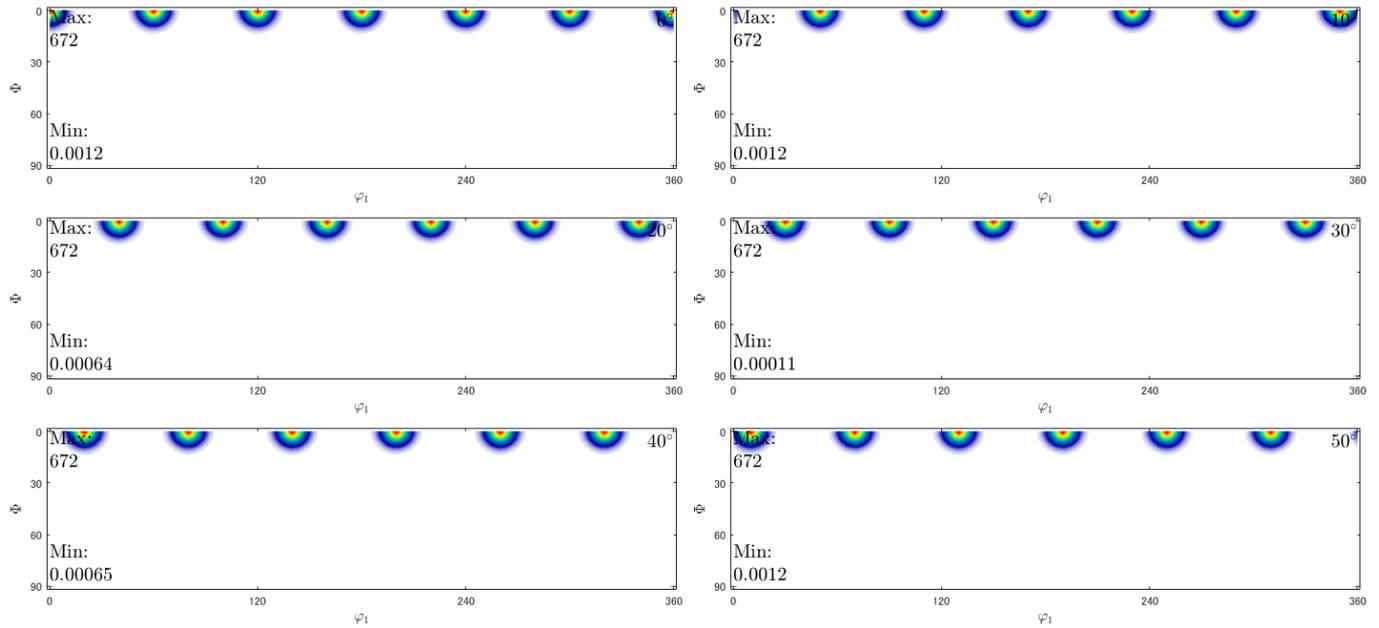
```
o = orientation.byMiller(varargin{:});
```

このため、5. 1. 1で評価を行った。

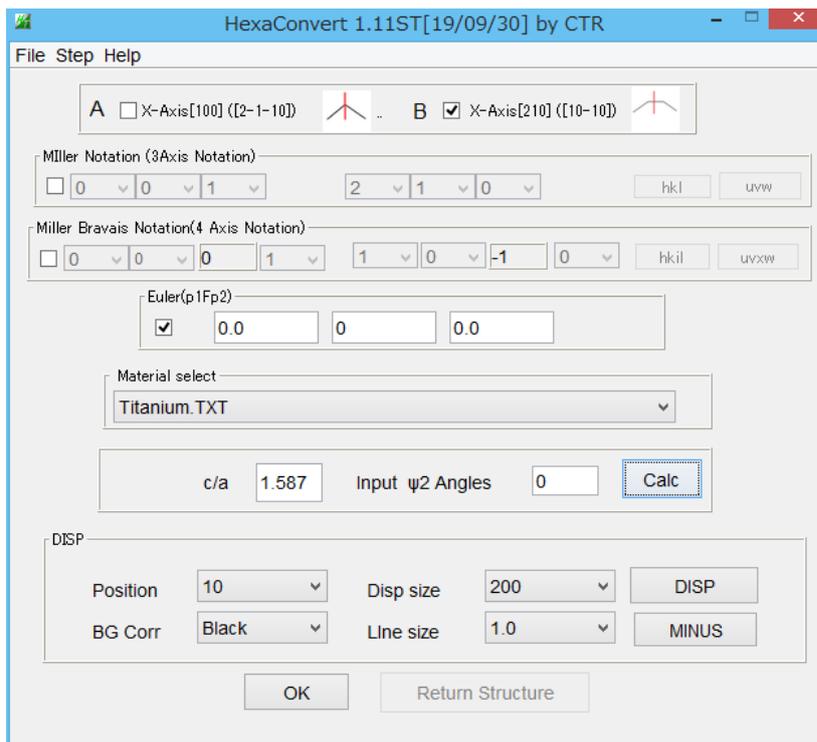
XRDの入力データ



計算された ODF 図



Euler 角度 (0, 0, 0) で B-Type の(0001)[10-10] (001[210])に位置する。



Unimodal () でODF図を作成する

```
CS = crystalSymmetry('6/mmm', [2.95 2.95 4.686], 'X| |a*', 'Y| |b', 'Z| |c*', 'mineral', 'Titanium', 'color', 'light blue');
```

```
SS = specimenSymmetry('1');
```

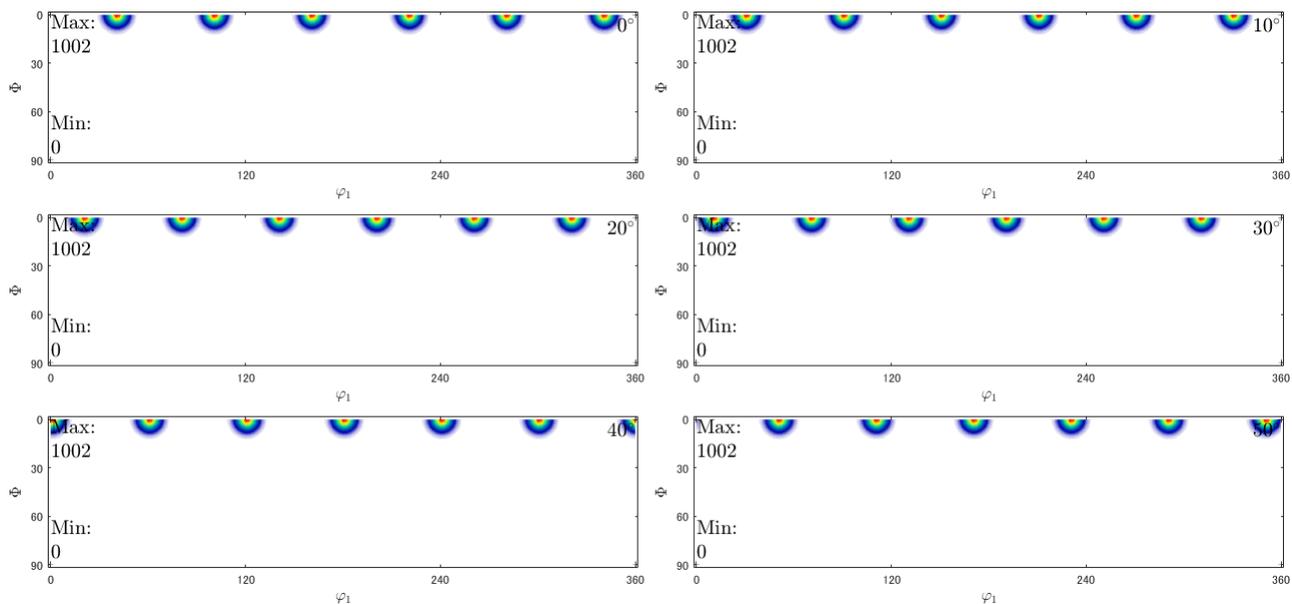
```
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree);
```

(001)[10-10] (001)[210] を作成

```
ori = orientation('Miller',[0,0,1],[2,1,0],CS,SS);
```

```
odf=unimodalODF(ori,psi);
```

```
plot(odf)
```

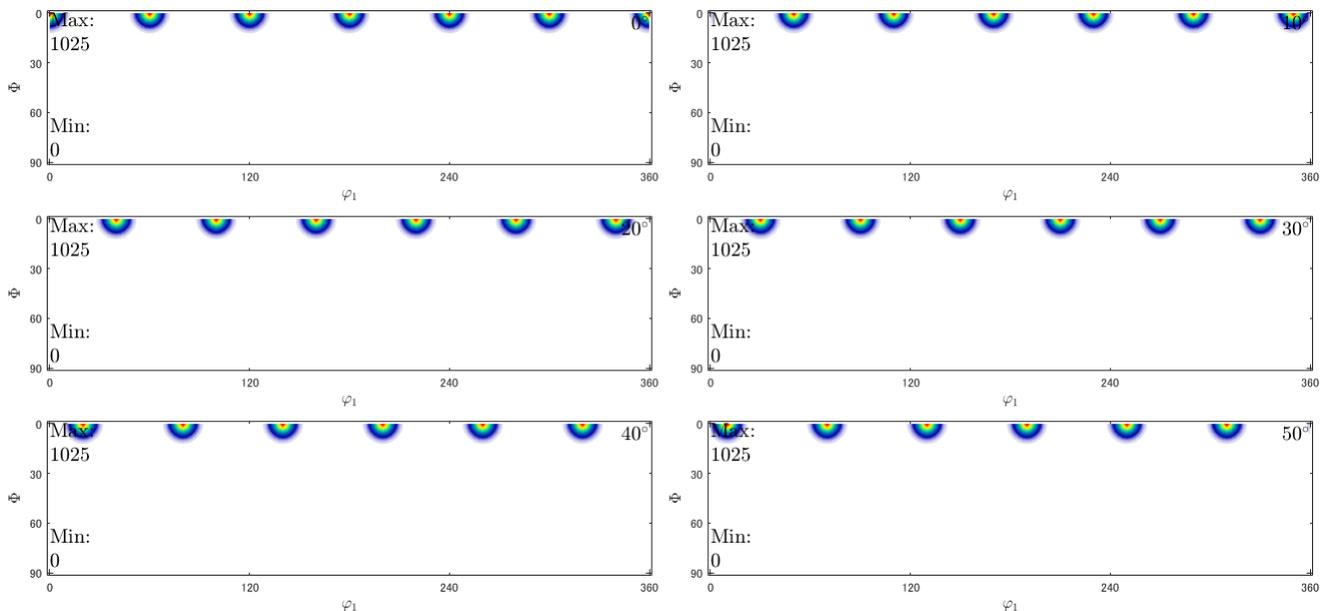


(0001)[2-1-10] (001)[100] を作成

```
ori = orientation('Miller',[0,0,1],[1,0,0],CS,SS);
```

```
odf=unimodalODF(ori,psi);
```

```
plot(odf)
```



(001)[210]で作成では φ_1 が30度シフトするので、unimodal()はA-T y p e で計算される。