

MTEXODF ソフトウェアによる Volume Fraction 計算の注意点

2025年03月31日

Help Tex Office

1. 概要

MTEXはEBSDとXRDの解析を行い、シュミレーションも行える。

方位をシュミレーションで計算すると、Triclinicで計算されている。

例えば、copperをシュミレーションすると

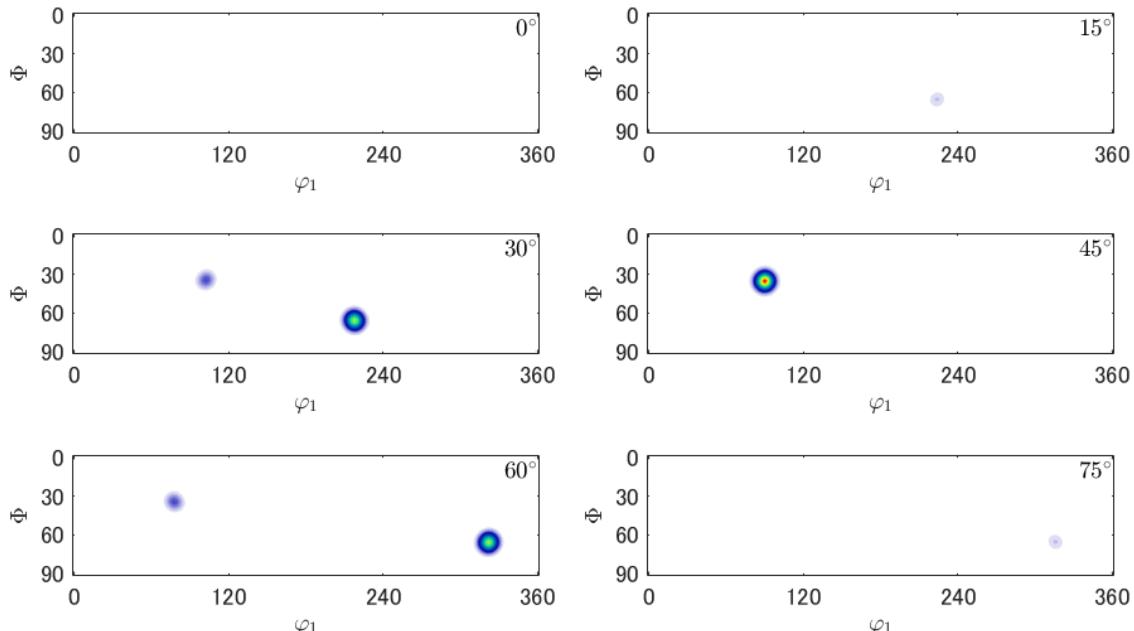
CS=crystalSymmetry('cubic')

SS=specimenSymmetry('1') //triclinic

copper=orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS,SS)

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

odf=unimodalODF(copper,psi)



[value,ori]=max(odf,'numLocal',5)

value = 512.4413 512.3739

ori = orientation (m-3m -> xyz)

size: 1 x 2

Bunge Euler angles in degree

phi1 Phi phi2 Inv.

90.028 35.2488 225.013 0

90.0159 35.3289 224.939 0

volume(odf,copper,15*degree)

ans = 0.9939

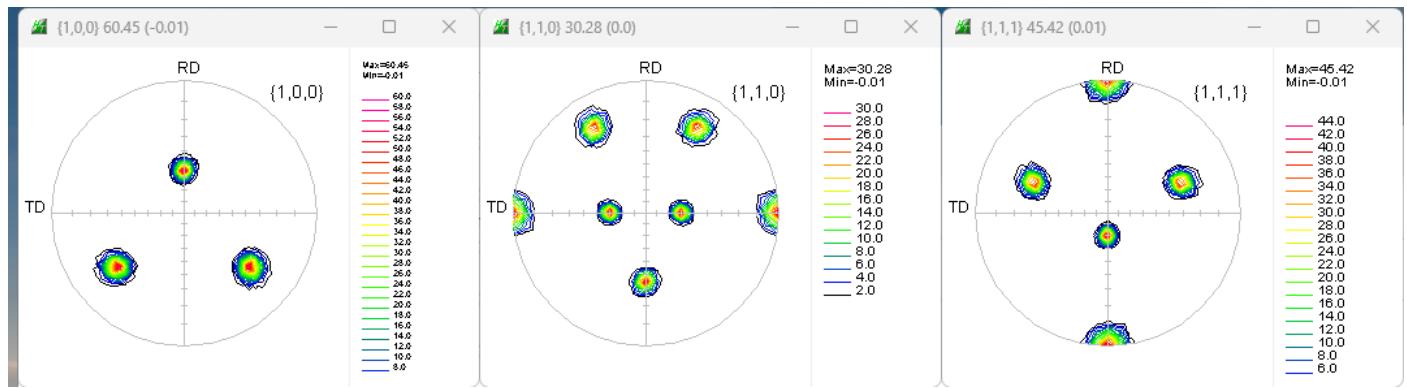
しかしXRDデータは上記データではなく、Orthorhombic化されたデータを測定している。

このため、XRDデータからVolumeを求める場合、MTEXの解析は

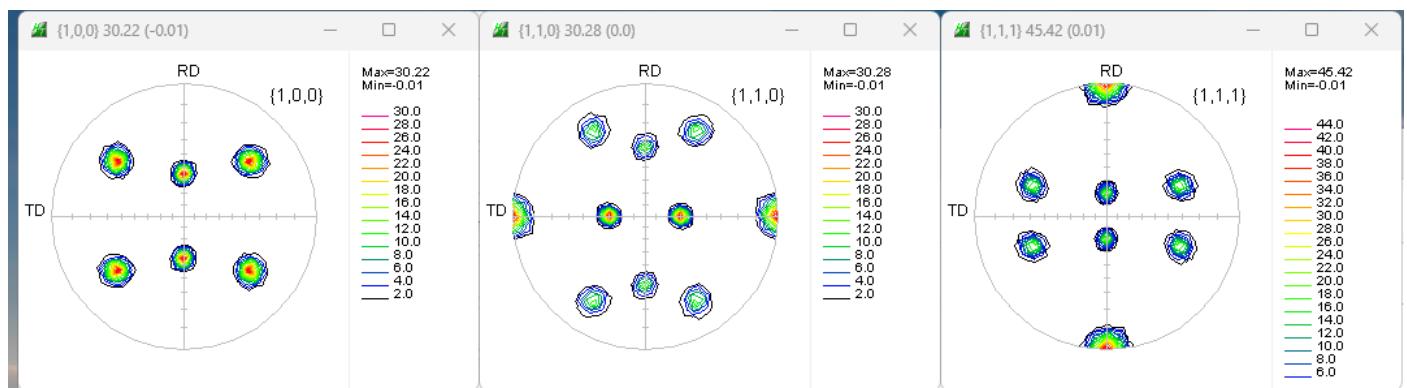
SS=specimenSymmetry('orthorhombic')

として解析を行う。

Exportされた極点図

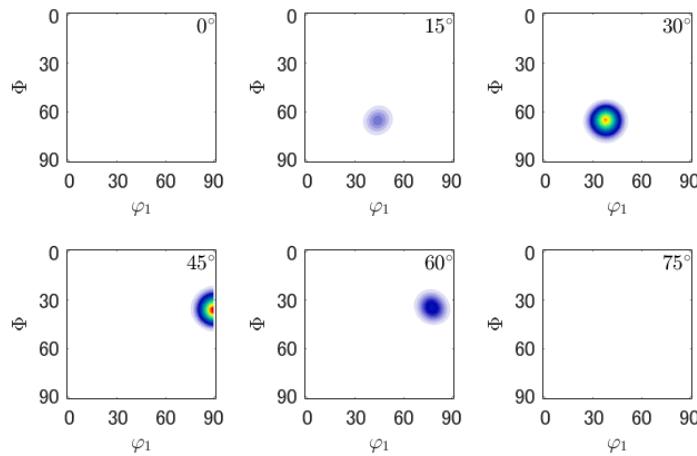


XRDで測定される極点図



XRD測定データからvolumeを求める。

```
>> import_wizard  
>> ortho  
SS = specimenSymmetry('1') -> SS = specimenSymmetry('orthorhombic')  
>> SS = specimenSymmetry('orthorhombic')  
新しSSでpfを計算  
>> pf = PoleFigure.load(fname,h,CS,SS,'interface','xrd');  
>> odf=calcODF(pf)
```



```
copper= orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS,SS)  
>> [value,ori]=max(odf,'numLocal',5)  
value = 158.8513 86.9210 0.1048 0.0699 0.0218  
ori = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))  
size: 1 x 5  
Bunge Euler angles in degree  
phi1 Phi phi2 Inv.  
90.0612 36.1843 225.058 0  
139.98 60.3467 244.524 0  
163.354 47.5175 203.894 0  
140.808 19.3372 206.489 0  
161 25.9808 161.513 0
```

```
>> volume(odf,copper,15*degree)  
progress: 100%  
ans = 0.9489
```

OrthorhombicでXRDの体積分率を求められる。

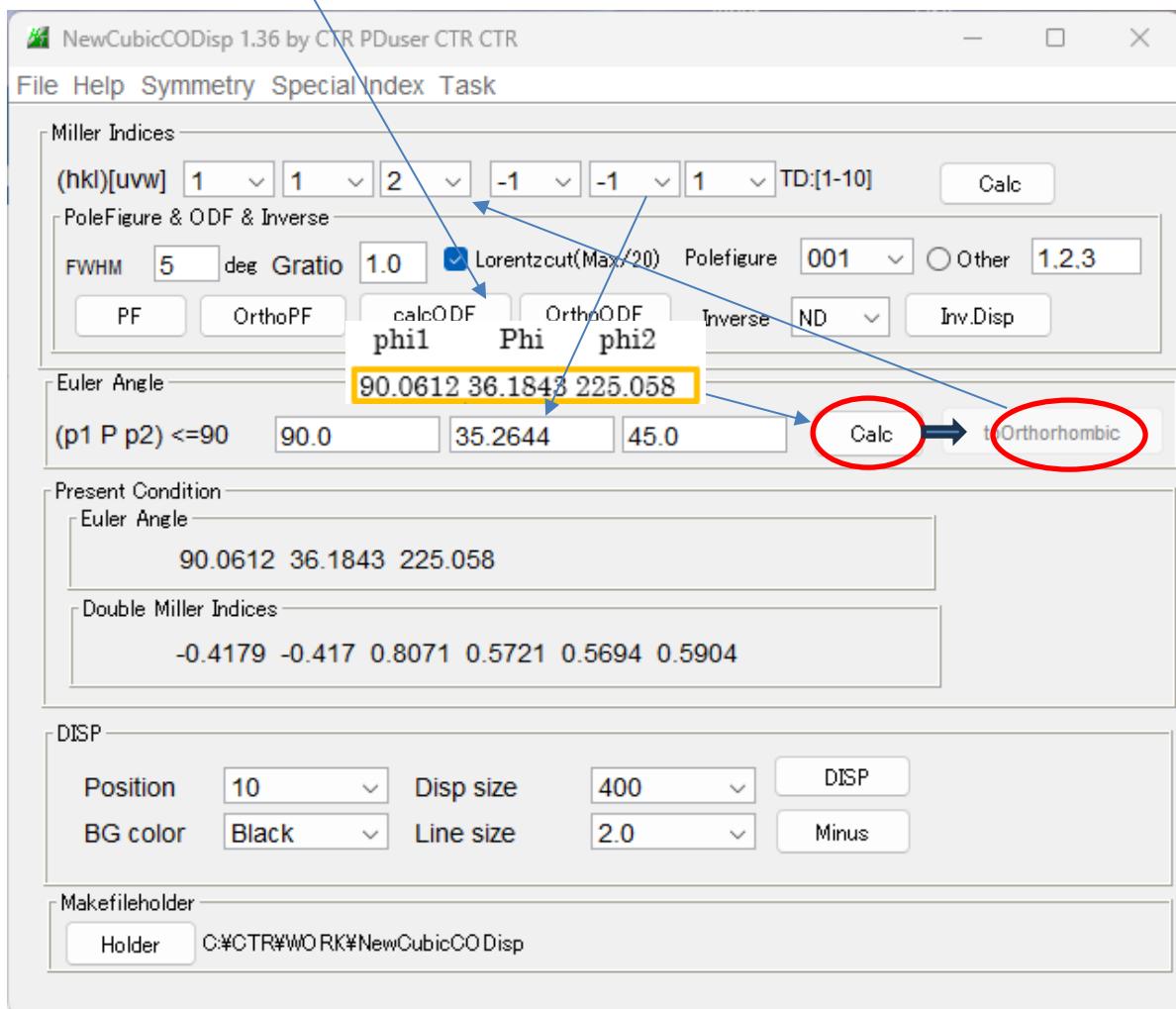
方位が不明な場合

```
>> [value,ori]=max(odf,'numLocal',5)
value = 158.8513 86.9210 0.1048 0.0699 0.0218
ori = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
size: 1 x 5
```

Bunge Euler angles in degree

phi1 Phi phi2 Inv.

90.0612 36.1843 225.058	0
139.98 60.3467 244.524	0
163.354 47.5175 203.894	0
140.808 19.3372 206.489	0
161 25.9808 161.513	0



phi1 Phi phi2

90.0612 36.1843 225.058 を入力し。c a 1 c -> toOrthorhombic

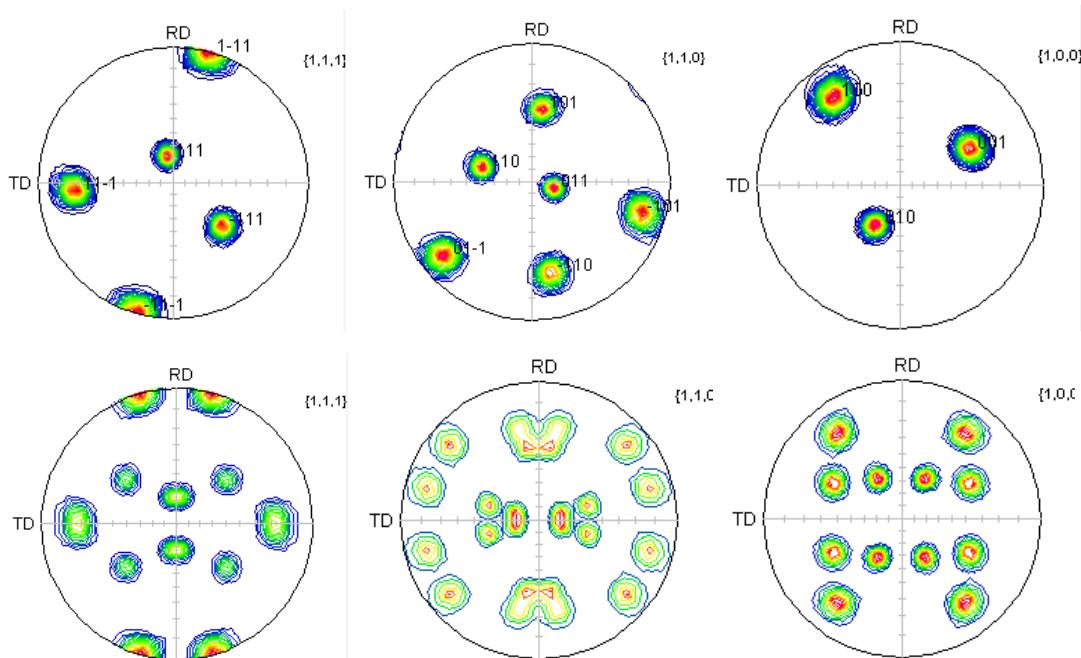
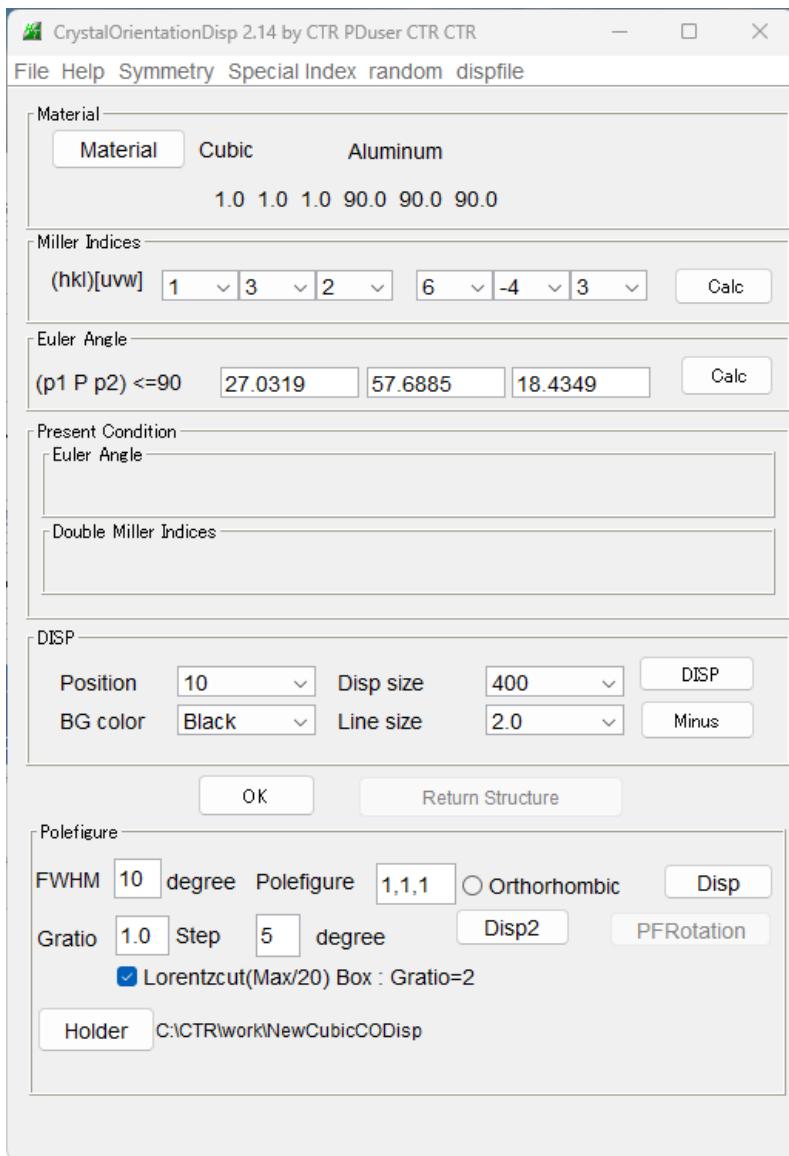
(p1 P p2) <=90 から 9 0. 0, 3 5. 3 6, 4 5. 0 -> (1 1 2) [-1 -1 1]

```
copper=orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS,SS)
```

あるいは

```
copper=orientation.byEuler(90.0*degree,35.26*degree,45.0*degree,CS,SS)
```

S方位の場合



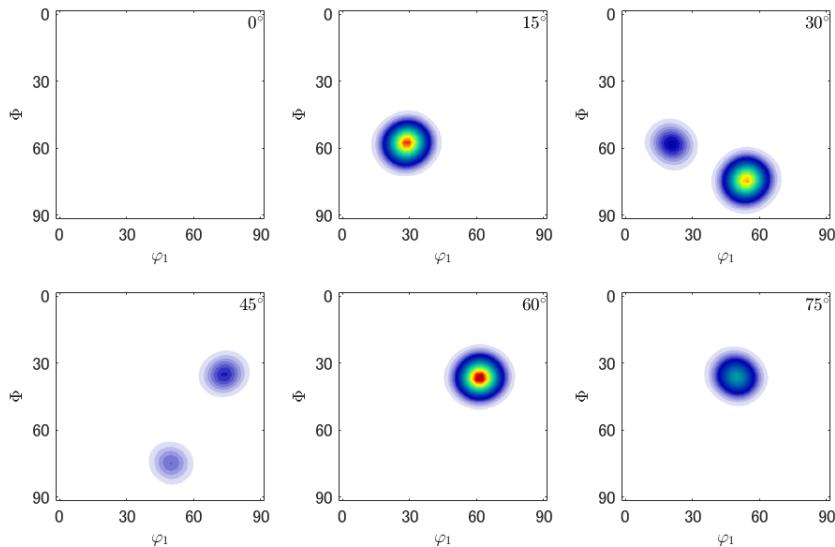
orthorhombicをtriclinicで解析を行うとS方位のvolumeは1/4になります。
brass, copper方位は1/2

Orthorhombic データを import した後

SS = specimenSymmetry('orthorhombic')

pf = PoleFigure. load(fname, h, CS, SS, 'interface', 'xrd');

odf=calcODF(pf)



>> [value,ori]=max(odf,'numLocal',5)

value = 64.0962 36.1868 24.5402 8.9308 9.2960

ori = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))

size: 1 x 5

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

Miller Indices

(hkl)[uvw]	-1	-2	3	6	3	4	Calc
------------	----	----	---	---	---	---	------

Euler Angle

(p1 P p2) <= 90	58.9799	36.6992	153.4349	Calc
-----------------	---------	---------	----------	------

Present Condition

Euler Angle

121.181 36.5843 206.618

Double Miller Indices

-0.267 -0.5328 0.803 0.7707 0.3822 0.5099

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

volume(odf,s,15*degree)

progress: 100%

ans = 0.9175

Triclinic で計算

SS = specimenSymmetry('1') で ODF 解析

>> volume(odf,s,15*degree)

ans = 0.2269

OrthorhombicデータをTriclinicで解析

[value,ori]=max(odf,'numLocal',5)

progress: 100%

value = 59.7539 59.7522 59.3696 59.3607 9.1131

ori = orientation (m-3m -> xyz)

size: 1 x 5

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

上記データから mtexelertohkl ソフトウェアで eul -> hkl 一括変換が可能

58.98 36.699 333.435 (-1 2 3)[6 -3 4]

58.98 36.699 153.435 (-1 -2 3)[6 3 4]

238.98 36.699 153.435 (1 -2 3)[6 -3 -4]

301.02 36.699 26.565 (1 2 3)[6 3 -4]

73.221 25.239 315.0 (-1 1 3)[2 -1 1]

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 (m-3m -> xyz)

Bunge Euler angles in degree

phi1	Phi	phi2	Inv.
238.98	36.6992	333.435	0

ans = 0.2260

この部分が4回計算できるが、実用的ではない。

実試料の場合、複数の方位が出現し複数の方位に対し同一の計算を行うのは煩わしい