

## MTEXにおけるODF解析

方位はeuler角度 ( $\phi 1, \Phi, \phi 2$ ) を中心に全方向に広がりをもって存在すると考えると方向により広がりが異なる事も考えられる。又、方位よっては個々の広がりも異なる事も予想されるeuler角度  $\{0, 45, 0\} - \{90, 45, 0\}$  の線上に半価幅の異なる方位を作成した。1回目は、半価幅を5, 10, 15degとし、2回目は10, 15, 20degで極点図を作成しMTEXでcalcODF (pf) 計算すると、すべての方位に関して半価幅5degで計算が行われた。EBSDデータでは、データによって、5deg, 10degで計算されている。

2020年11月05日

*HelperTex Office*

## 概要

E B S D, X R DデータのODF解析をM T E Xで行うと、異常にODF形状が歪められている事に関して調査を行ないました。

調査の方法は、L a b o T e xで半価幅の異なる方位を1 0 %としr a n d o mを6 0 %としたODFを作成し、極点図をE x p o r t しM T E Xで解析し動作を調べてみます。

Model ODF

Crystal Symmetry: **C** (Cubic)

Sample Symmetry: **Triclinic**

Grid Cells for Output ODF: 5.0\*5.0

Step: 0.50  
Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 3: 100.0%  
FWHM  $\phi_1$  = 15.00  
Component No. 3: 100.0%  
FWHM  $\Phi$  = 15.00  
Component No. 3: 100.0%  
FWHM  $\phi_2$  = 15.00

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\Phi$	FWHM $\phi_2$	Volume Fraction
1	{ 20.00, 45.00, 0.00} NO1	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	6.00	5.00	5.00	10 %
2	{ 45.00, 45.00, 0.00} NO2	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.00	10.00	10.00	10 %
3	{ 70.00, 45.00, 0.00} NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	15.00	15.00	15.00	10 %
4	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.00	10.00	10.00	10 %
5	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.00	10.00	10.00	10 %
6	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.00	10.00	10.00	10 %
7	{ 1 1 1 } < -1 -1 2 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.00	10.00	10.00	10 %
8	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.00	10.00	10.00	10 %
9	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.00	10.00	10.00	10 %
10	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.00	10.00	10.00	10 %

Sample Name: FWHM2

Project Name: Demo

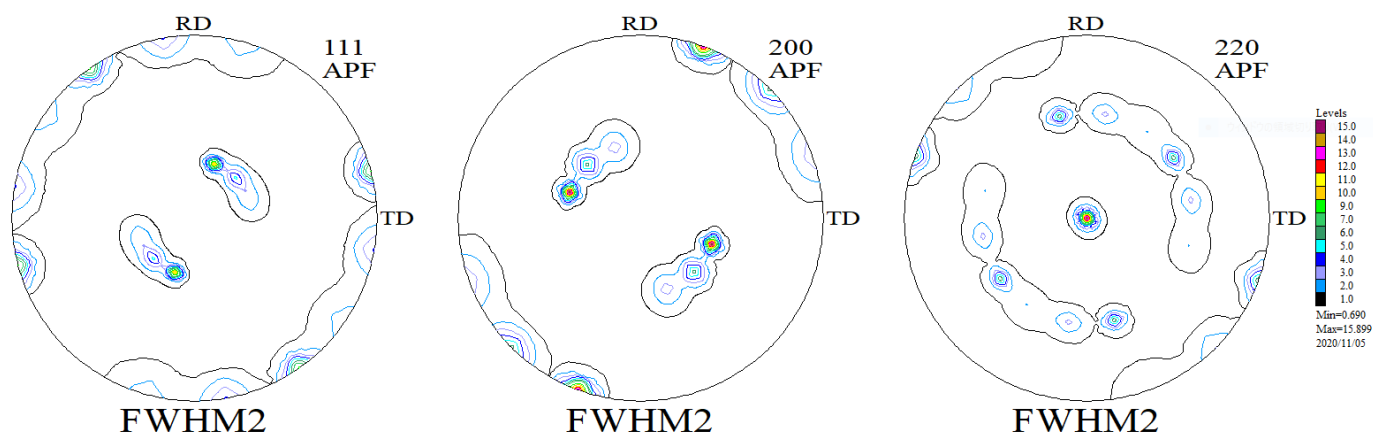
Cell Parameters (Relative):  
a: 1.00 b: 1.00 c: 1.00  
 $\alpha$ : 90.0  $\beta$ : 90.0  $\gamma$ : 90.0

Max. Linearity:  Background: 70 %

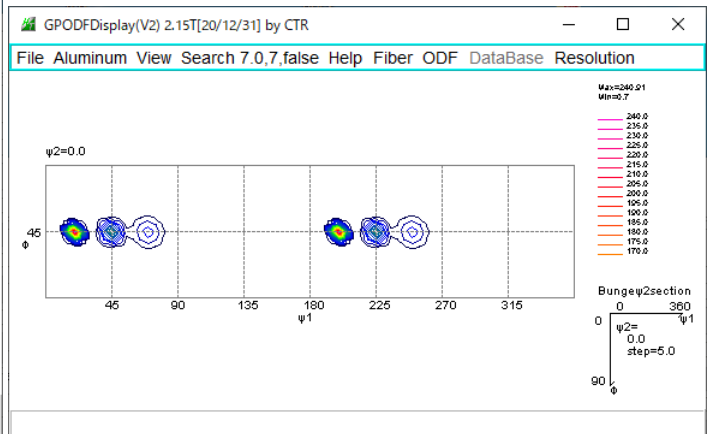
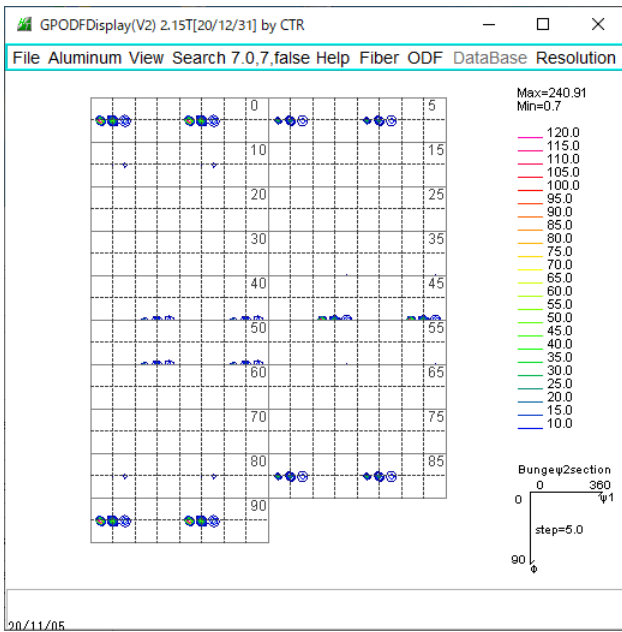
Creation of Model ODF

Exit

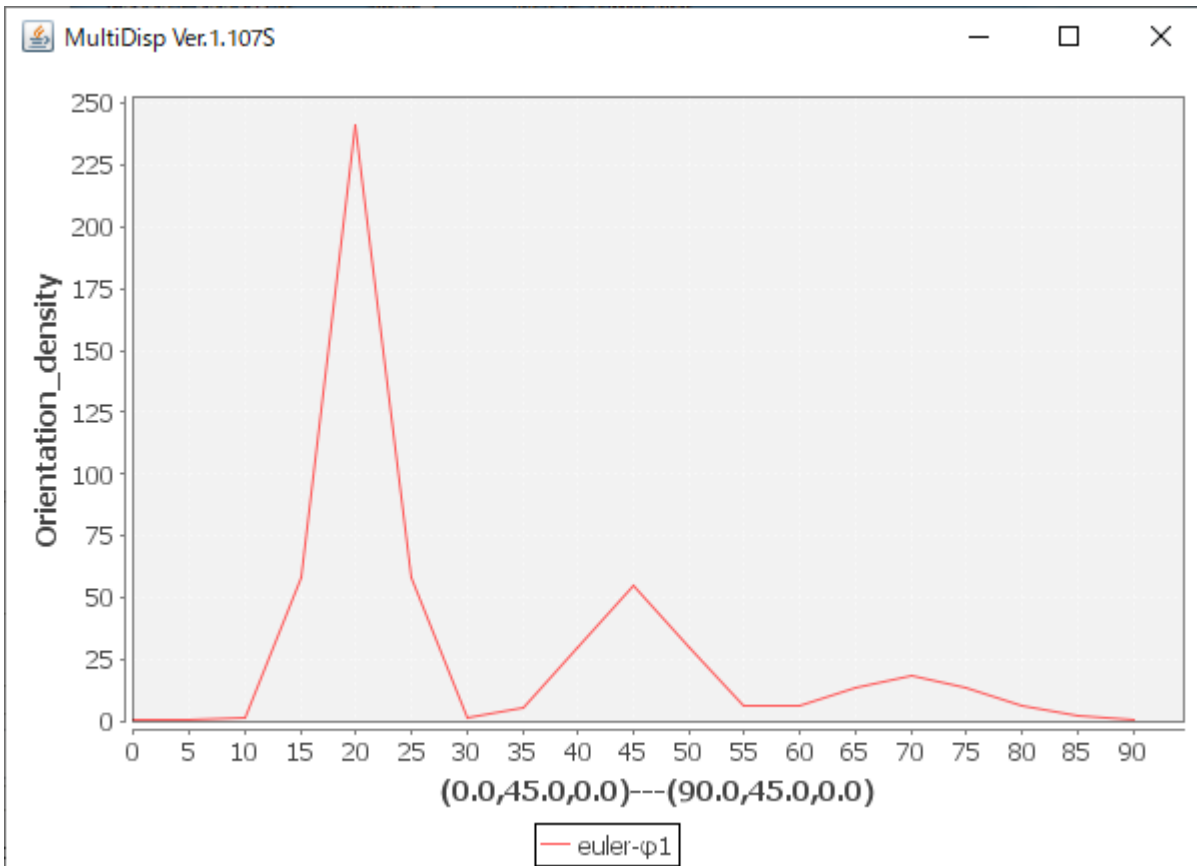
## 作成した極点図



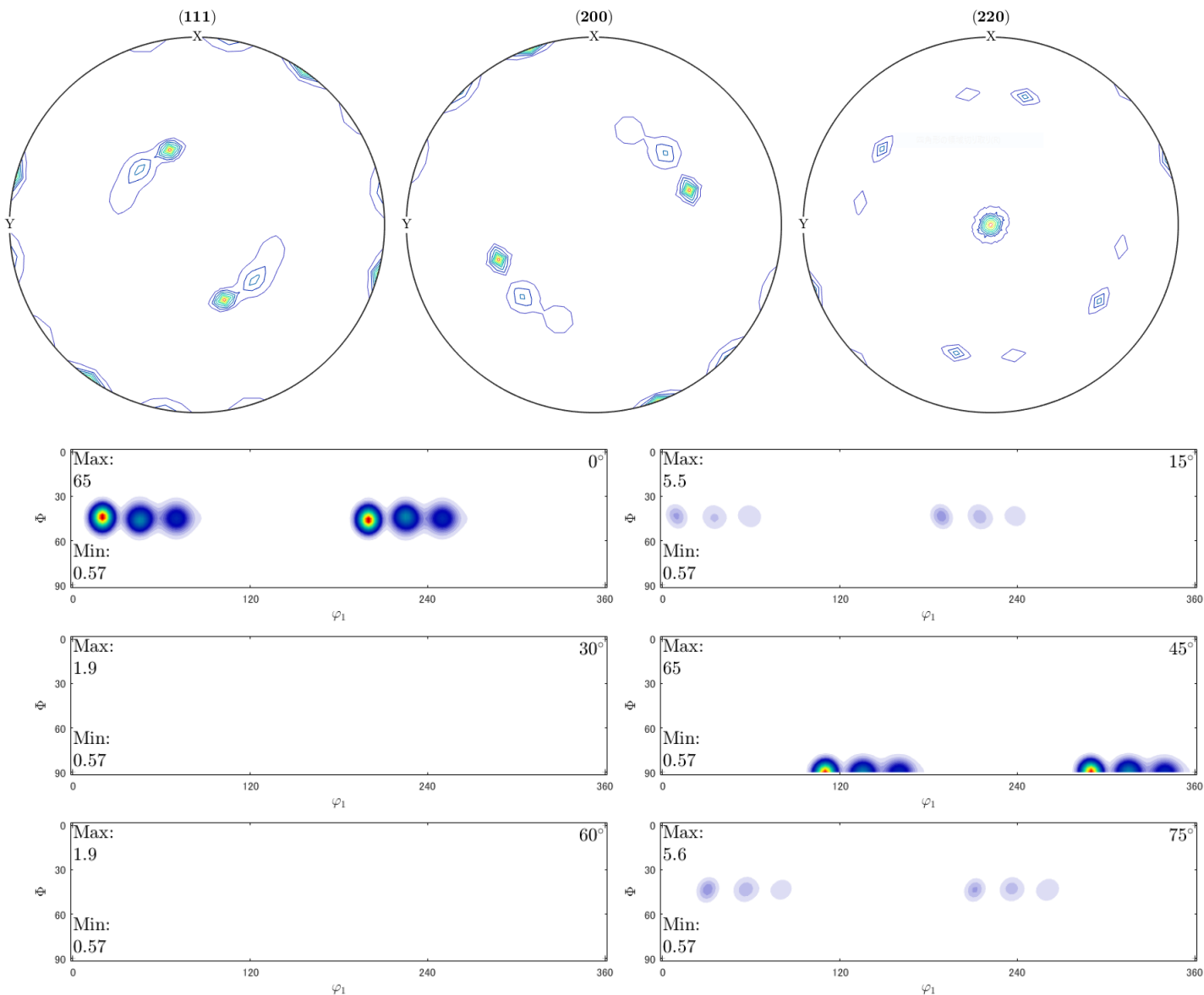
# ODF



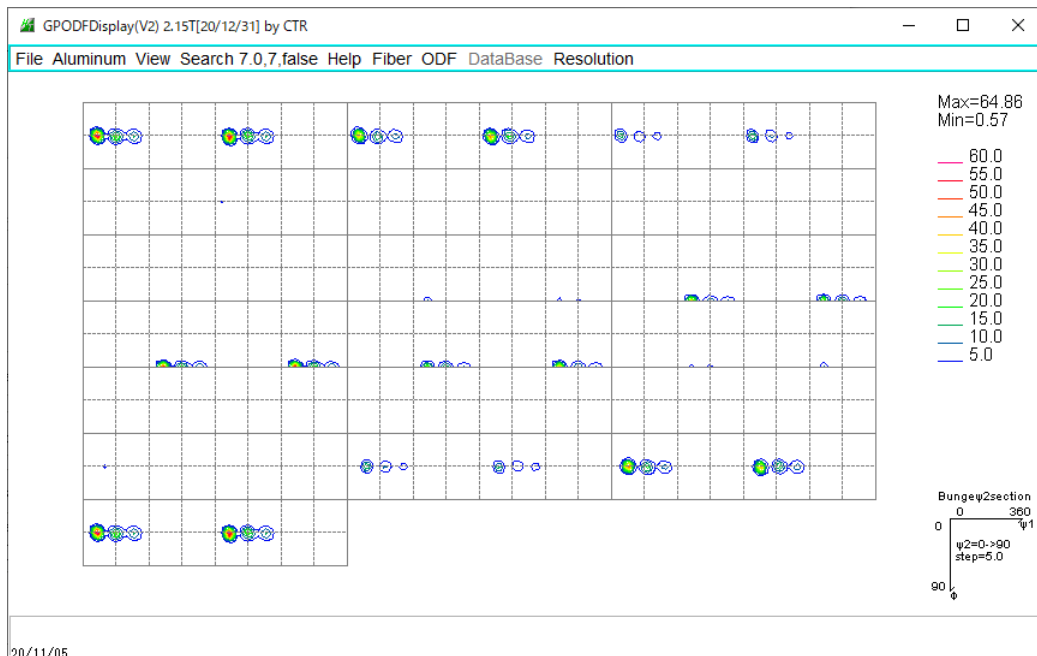
同一 VolumeFraction で半幅幅の異なるプロファイルが表示される。

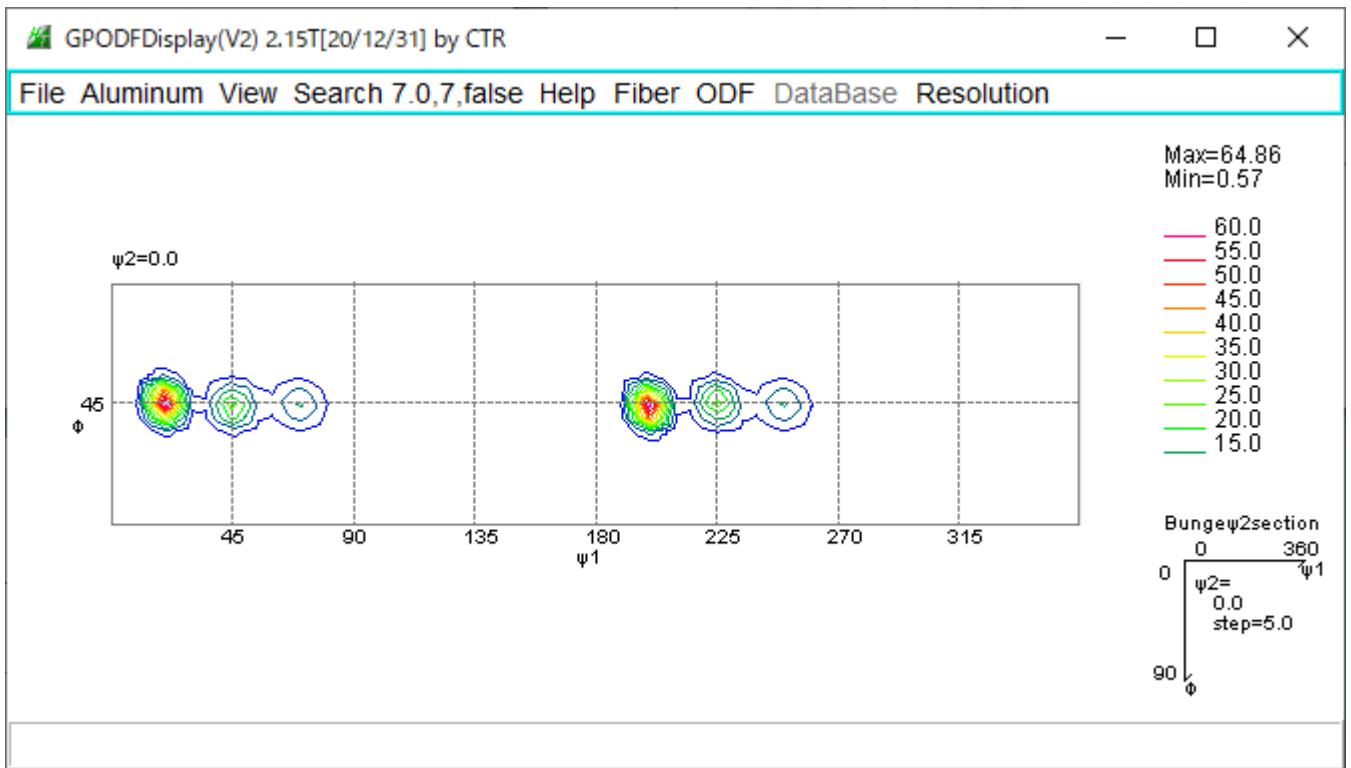


MT E Xで解析 (ODF 図を LaboTex に合わせるため CW とします)

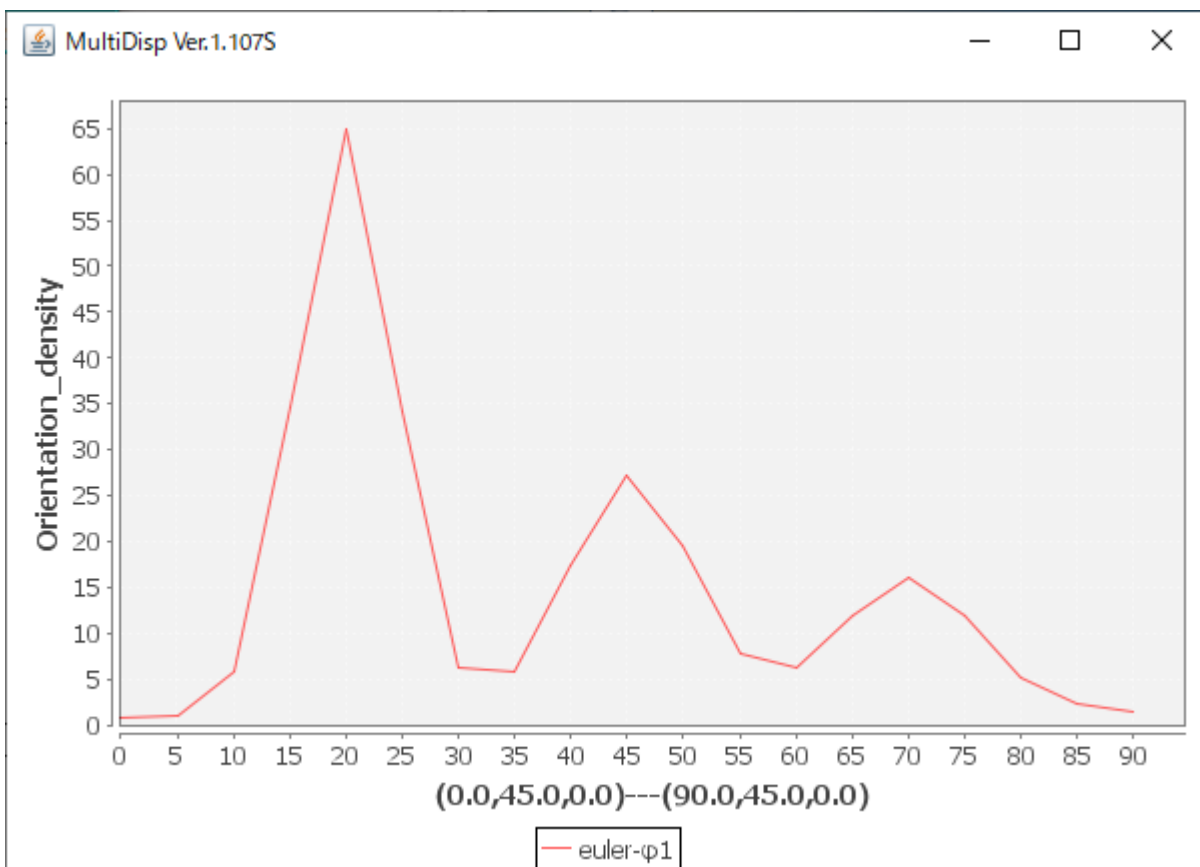


ODF 図を E X p o r t





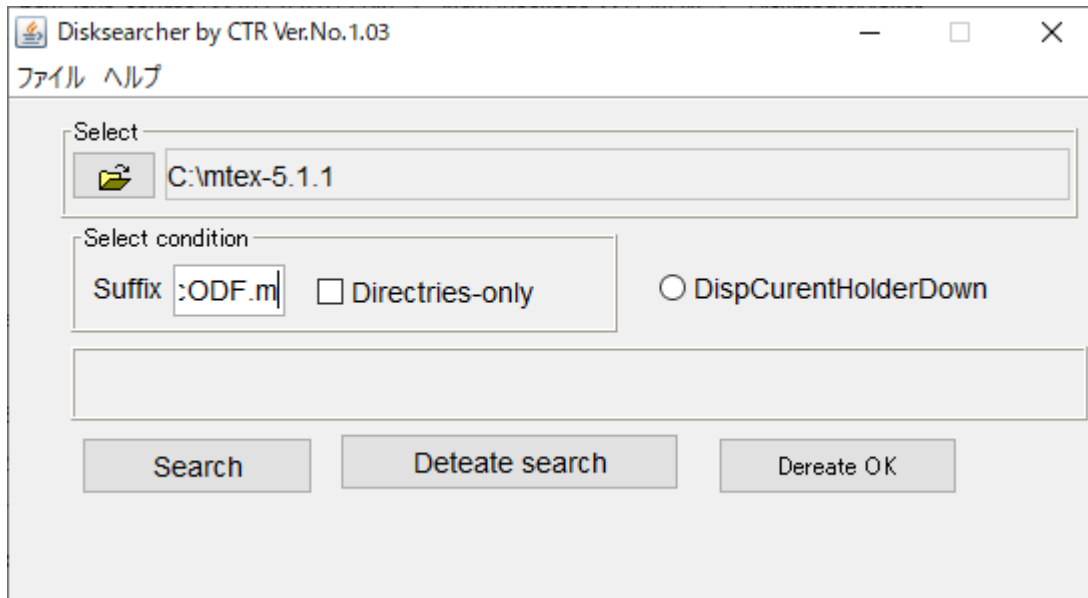
半価幅が同一である。



LaboTexに比べ、最大方位密度は低い。

半価幅は同一であるが、最大方位密度は1 : 2 : 4に見える。

MTEX 5. 1. 1のcalcODF. mファイル



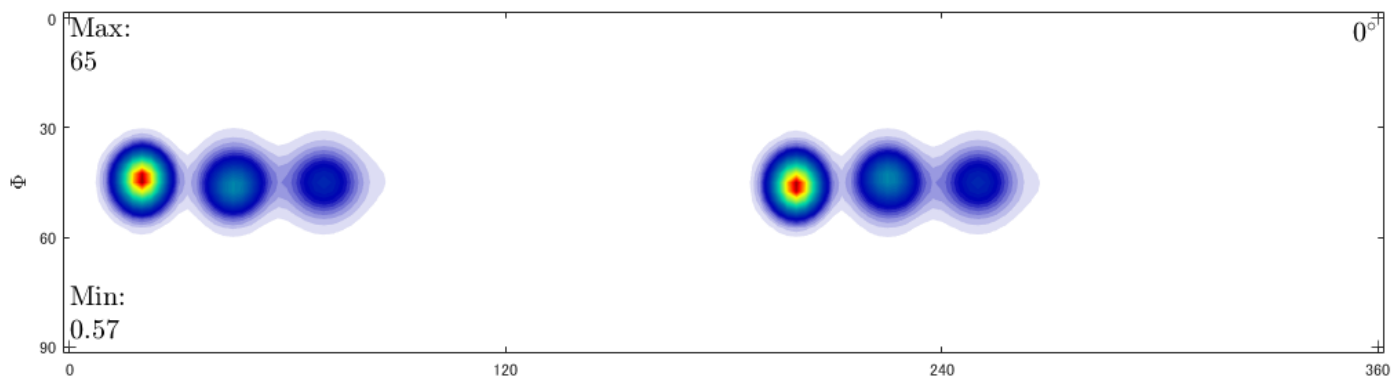
```
C:\mtex-5.1.1¥geometry¥@orientation¥calcODF.m
C:\mtex-5.1.1¥obsolete¥calcODF.m
C:\mtex-5.1.1¥PoleFigureAnalysis¥@MLSSolver¥calcODF.m
C:\mtex-5.1.1¥PoleFigureAnalysis¥@PoleFigure¥calcODF.m
```

この calcODF.m のどれかで動作している。

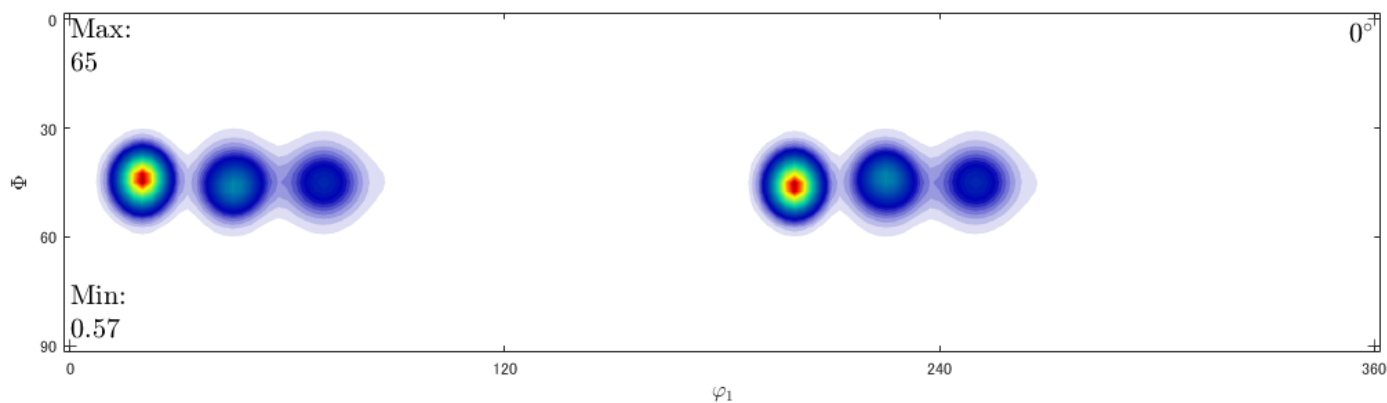
```
% Input↓
% ori - @orientation↓
%↓
% Output↓
% odf - @ODF↓
%↓
% Options↓
% weights - list of weights for the orientations↓
% halfwidth - halfwidth of the kernel function↓
% resolution - resolution of the grid where the ODF is approximated↓
% kernel - kernel function (default -- de la Valee Poussin kernel)↓
% order - order up to which Fourier coefficients are calculated↓
%↓
% Flags↓
% silent - no output↓
% exact - no approximation to a corser grid↓
% Fourier - force Fourier method↓
% Bingham - model bingham odf↓
% noFourier - no Fourier method↓
%↓
% extract kernel function↓
psi = deLaValeePoussinKernel('halfwidth',10*degree,varargin{:});↓
psi = get_option(varargin,'kernel',psi);↓
↓
```

内部的には、fwhm=10degで計算されている可能性があります。

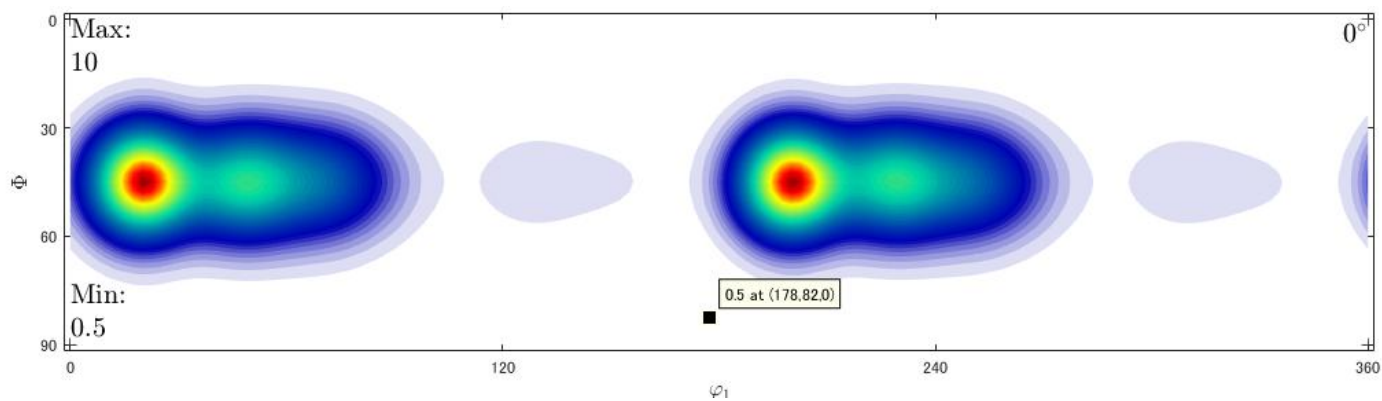
calcODF(pf)



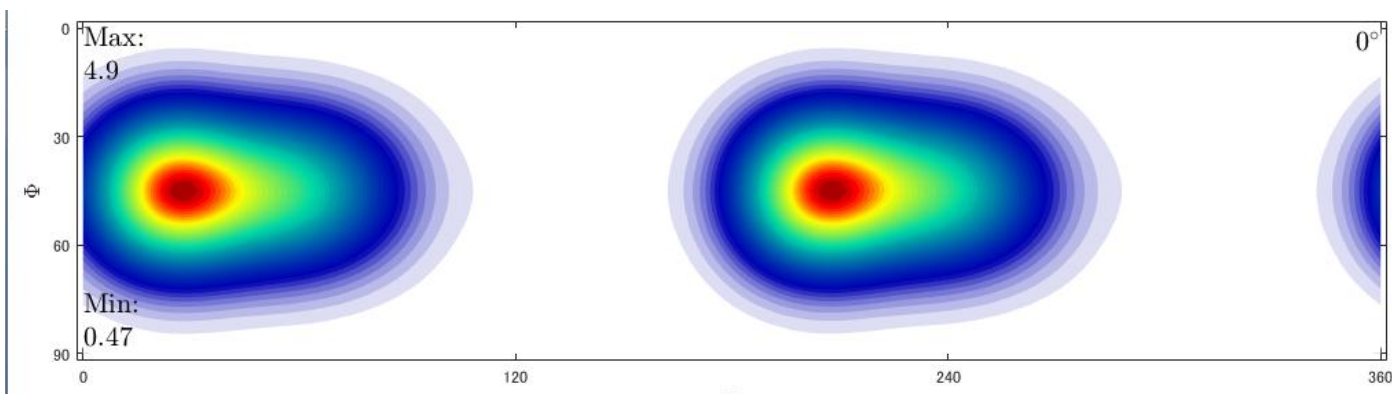
odf5=calcODF(pf,'halfwidth',5\*degree)



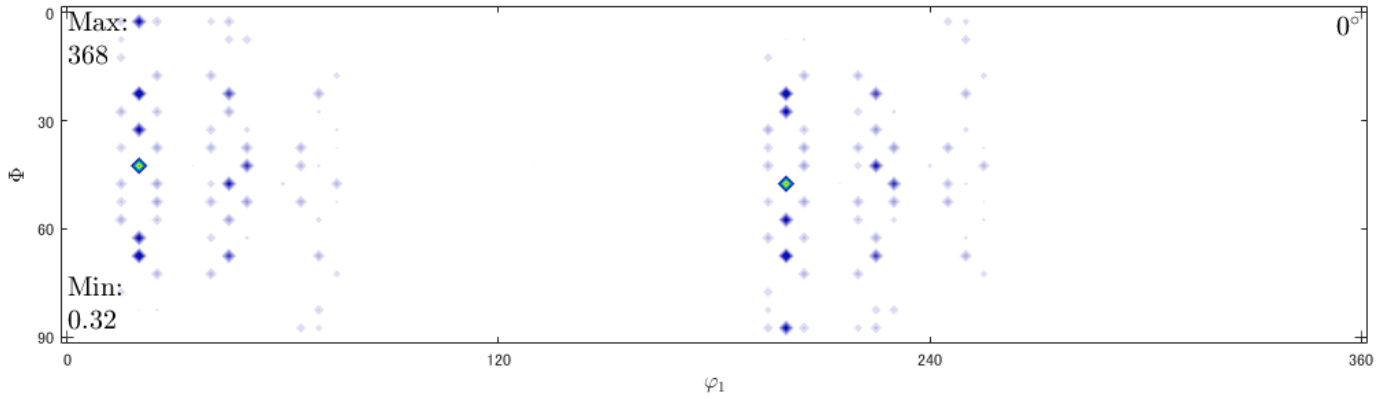
Odf10=calcODF(pf,'halfwidth',10\*degree)



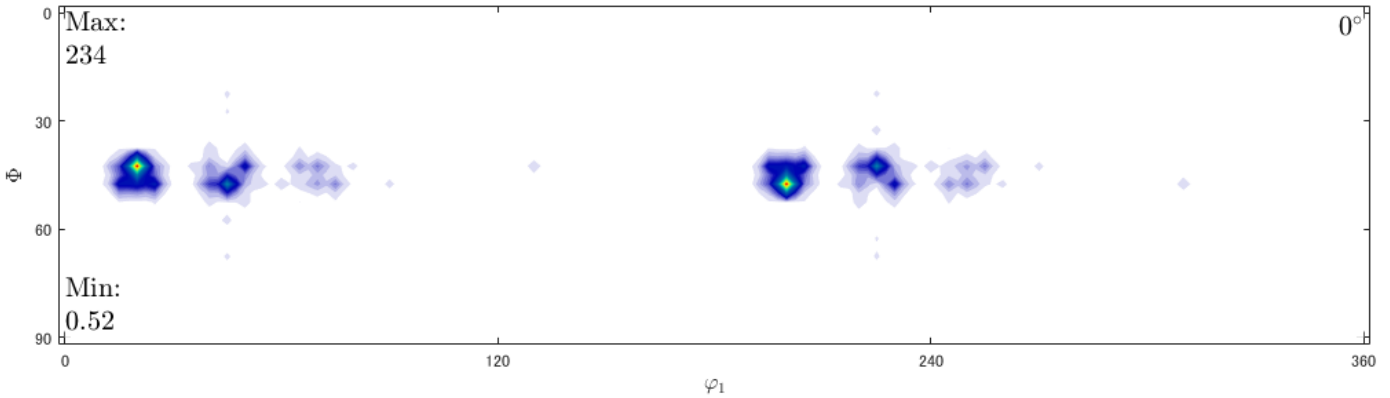
odf15=calcODF(pf,'halfwidth',15\*degree)



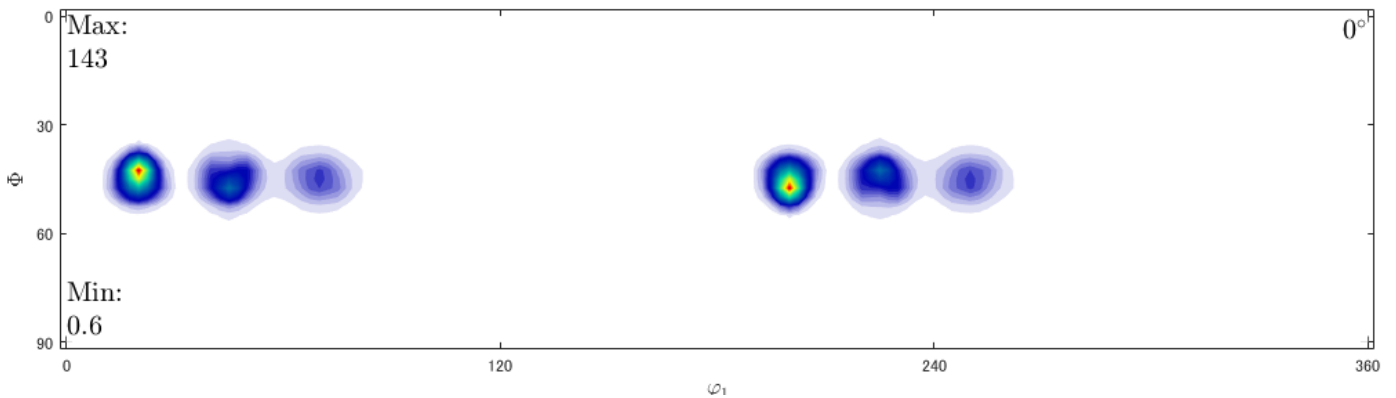
odf1=calcODF(pf,'halfwidth',1\*degree)



odf2=calcODF(pf,'halfwidth',2\*degree)



Odf3=calcODF(pf,'halfwidth',3\*degree)



calcODF(pf)では

```
odf = ODF (show methods, plot)
```

```
crystal symmetry : Aluminum (m-3m)
```

```
specimen symmetry : 1
```

```
Uniform portion:
```

```
weight: 0.57242
```

```
Radially symmetric portion:
```

```
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°
```

```
center: 4928 orientations, resolution: 5°
```

```
weight: 0.42758
```

では入力データの半化幅を変えた場合



Model ODF

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

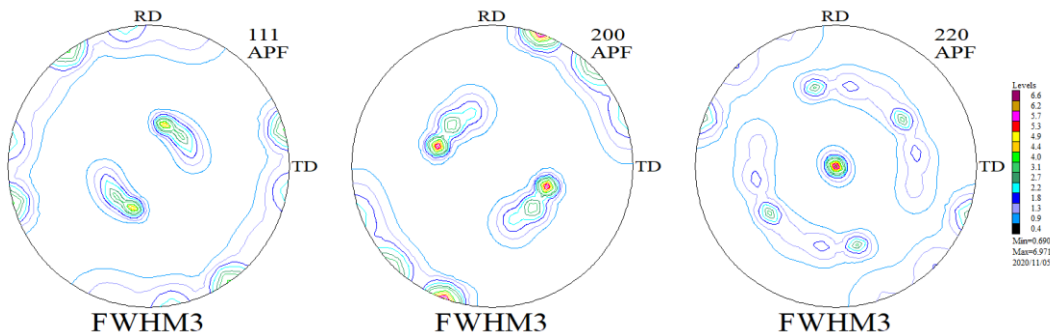
Component No. 3. 100.0% | Component No. 3. 100.0% | Component No. 3. 100.0%

FWHM  $\phi_1$  = 20.00 | FWHM  $\Phi$  = 20.00 | FWHM  $\phi_2$  = 20.00

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\Phi$	FWHM $\phi_2$	Volume Fraction
1	{ 20.00, 45.00, 0.00} NO1	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
2	{ 45.00, 45.00, 0.00} NO2	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	15.00	15.00	15.00	10 %
3	{ 70.00, 45.00, 0.00} NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	10 %
4	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
5	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 1 1 1 } < -1 -1 2 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 1 0 1 } < 5 2-5 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Sample Name: FWHM3 | Project Name: Demo | Cell Parameters (Relative): a: 1.0, b: 1.0, c: 1.0,  $\alpha$ : 90.0,  $\beta$ : 90.0,  $\gamma$ : 90.0 | Background: 70 %

Creation of Model ODF | Exit



odf = [ODF \(show methods, plot\)](#)

crystal symmetry : Aluminum (m-3m)  
specimen symmetry: 1

Uniform portion:  
weight: 0.6657

Radially symmetric portion:  
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°  
center: 4933 orientations, resolution: 5°  
weight: 0.3343

XRDの場合、入力データに関係なくすべての方位で半価幅を 5 d e g に固定して解析されている。

## E B S D の場合

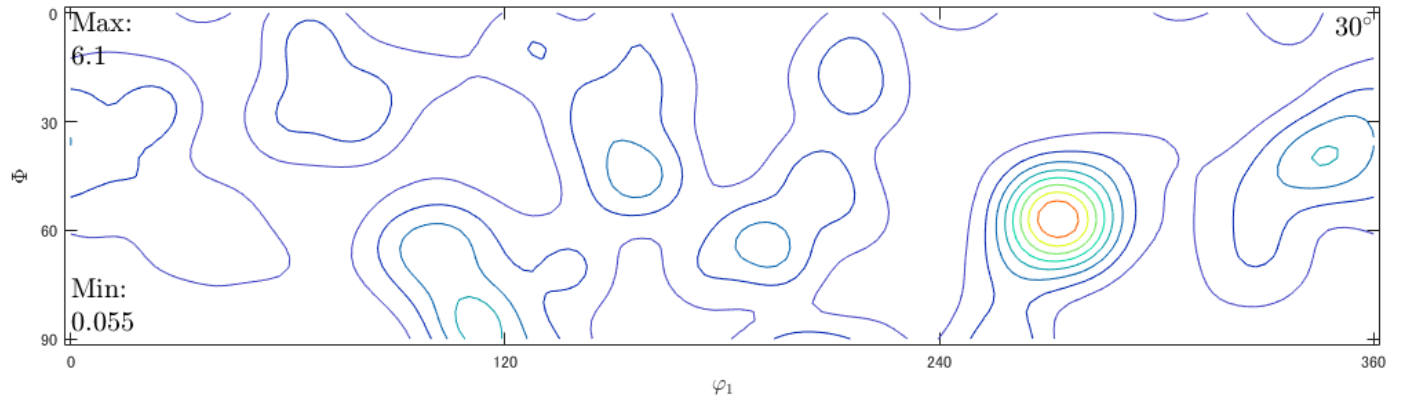
```
>> odf=calcODF(ans.orientations)

odf = ODF (show methods, plot)
crystal symmetry : Ferrite (432)
specimen symmetry : 1

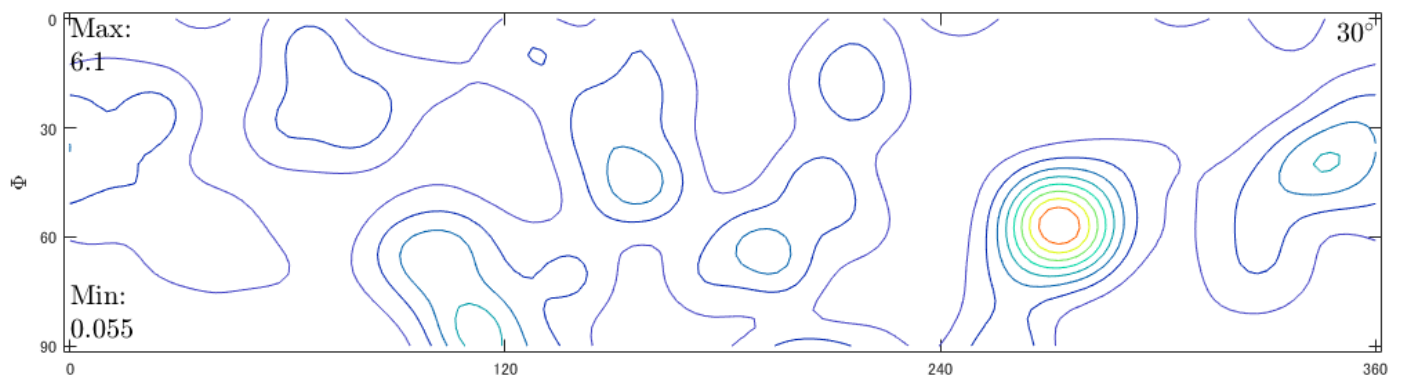
Harmonic portion:
degree: 28
weight: 1
```

halfwidth 表示なし

plot(odf,'contour')



plot(odf,'contour','halfwidth',5\*degree)



半価幅 5 d e g で計算される。

```
>> odf5=calcODF(ans.orientations,'halfwidth',5*degree)
```

```
odf5 = ODF (show methods, plot)  
crystal symmetry : Aluminum (432)  
specimen symmetry: 1
```

```
Radially symmetric portion:
```

```
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°  
center: 4030 orientations, resolution: 2.5°  
weight: 1
```

```
>> odf10=calcODF(ans.orientations,'halfwidth',10*degree)
```

```
odf10 = ODF (show methods, plot)  
crystal symmetry : Aluminum (432)  
specimen symmetry: 1
```

```
Harmonic portion:
```

```
degree: 28  
weight: 1
```

```
>> odf=calcODF(ans.orientations)
```

```
odf = ODF (show methods, plot)  
crystal symmetry : Aluminum (432)  
specimen symmetry: 1
```

```
Harmonic portion:
```

```
degree: 28  
weight: 1
```

このEBSDデータは半価幅10degで計算されている