

XRD極点図をMTEXで解析

XRDデータからMTEXでODF計算する場合、半価幅が狭い場合EBSDデータと同様に、fwhmは2度が適当であるが、半価幅が広い場合、fwhm5度は適当である。

2021年01月23日

HelperTex Office

概要

最近、EBSDデータを扱っていたが、EBSDデータのODF解析では、一般的なパラメータでは異常に丸みを帯びたODF図が描画される。

```
odf=calcDensity(ebsd('Aluminum').orientations)
```

このパラメータでは、`halfwidth=10deg` で計算される

EBSDデータをSORフォーマットに変換するとLaboTexでODF計算が出来る。

LaboTexと同じようなODF図を計算するには、

```
odf = calcDensity(ebsd('Aluminum').orientations,'halfwidth',2*degree)
```

とする。

同じようにXRD極点図からODF計算する場合のパラメータを調べる。

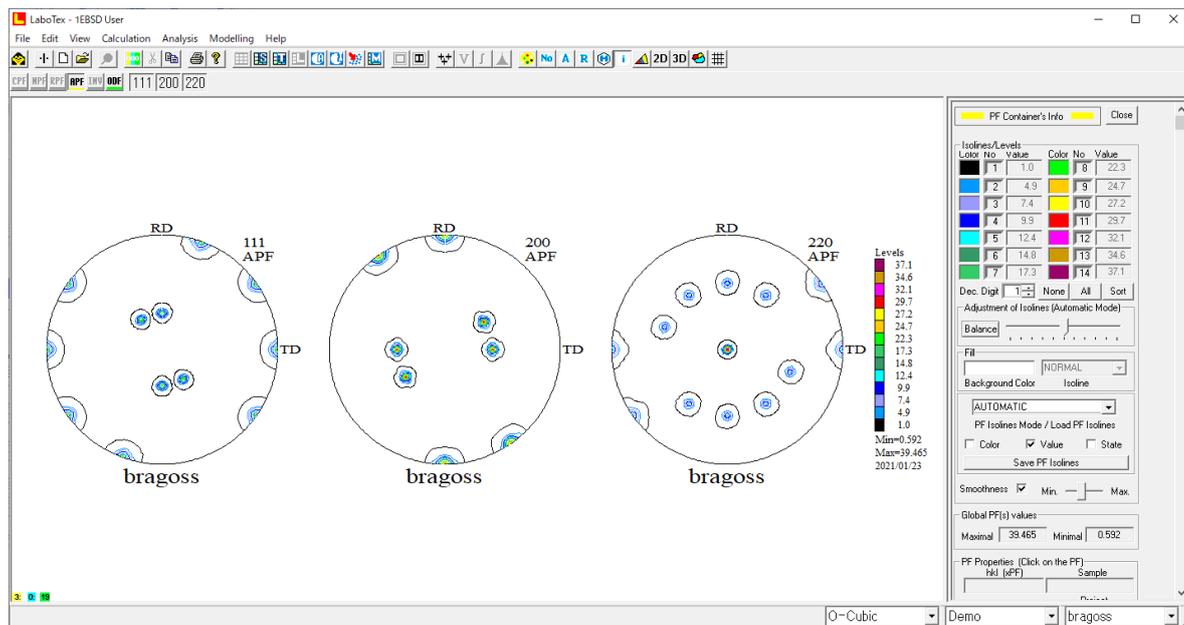
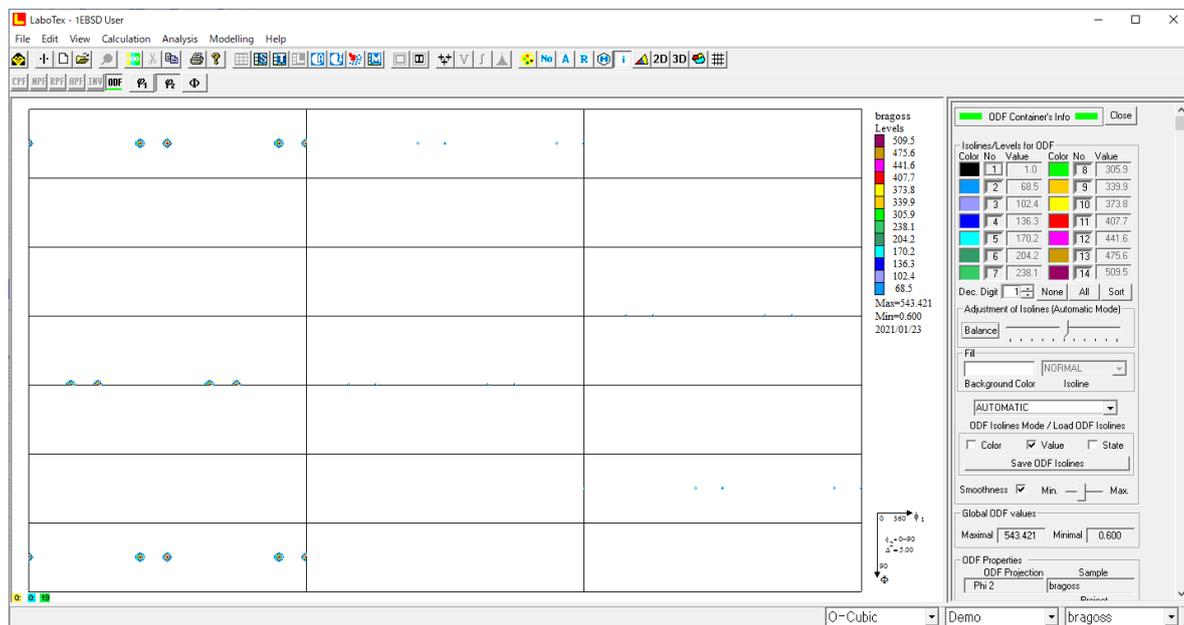
方位半価幅を5degと15degをLaboTexで作成し調べてみる

入力データ (半価幅5deg)

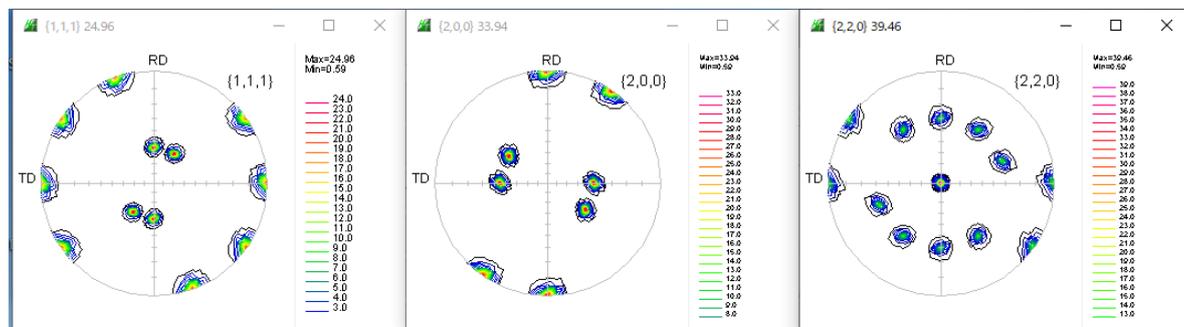
No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ_1	FWHM Φ	FWHM ϕ_2	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	5.00	5.00	5.00	20 %
2	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
3	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
4	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	5.00	5.00	5.00	20 %
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 %

でODF図を作成し、極点図をExportし、MTEXで計算する。

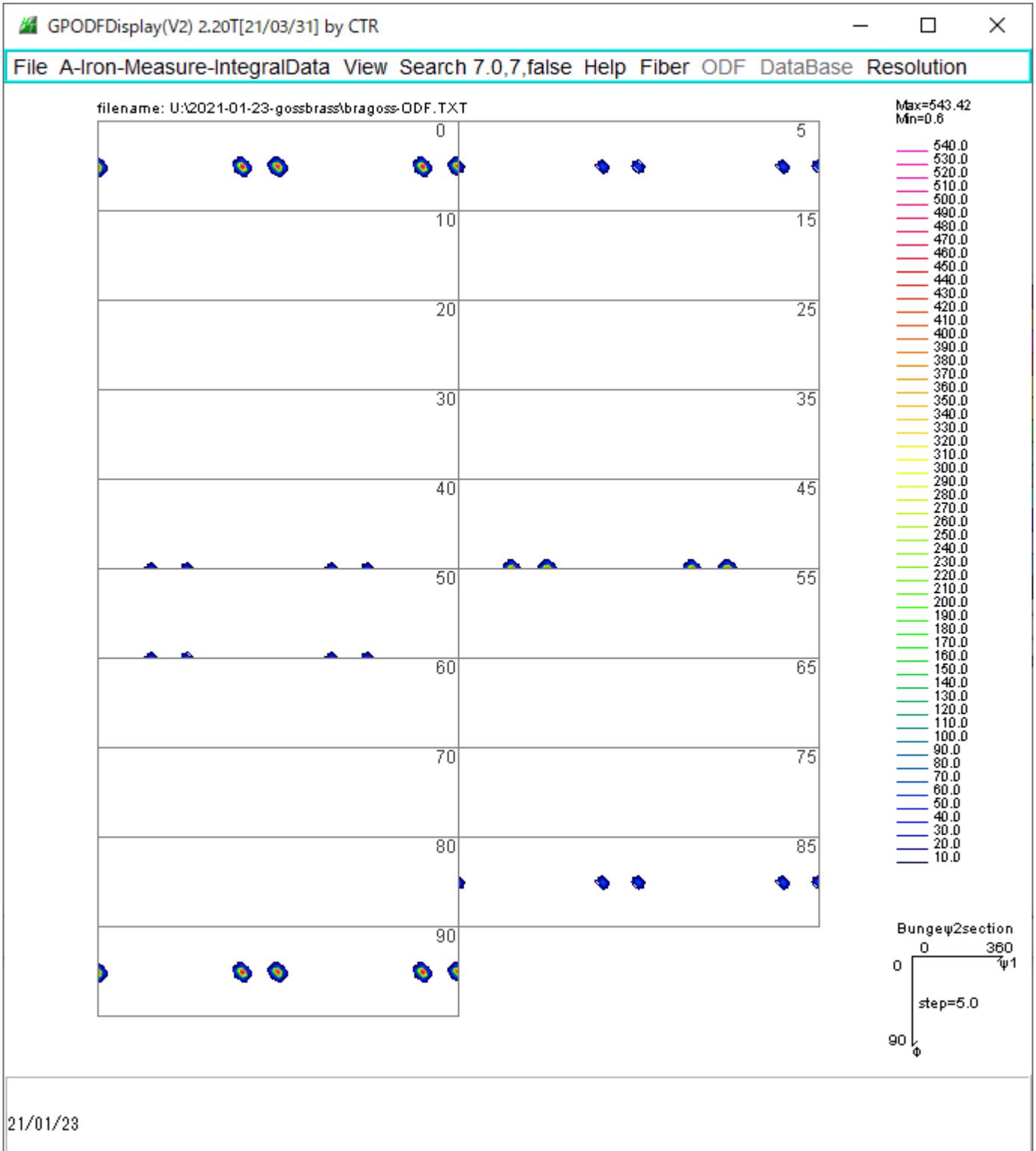
LaboTexの結果



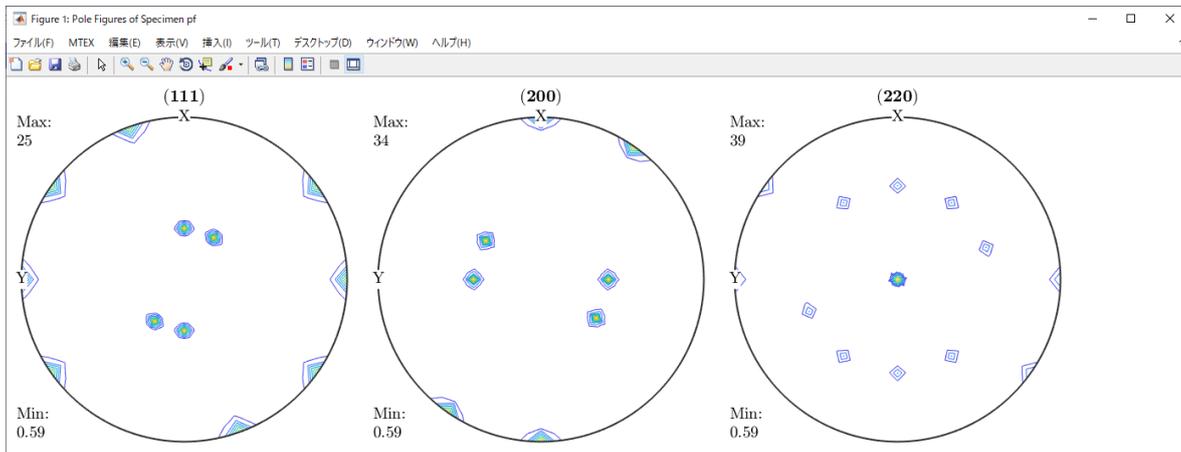
MT EXに入力する極点図



目標とするODF図 (LaboTexのODF図をEXPORTし、CTRで表示)



MT E Xに読み込む



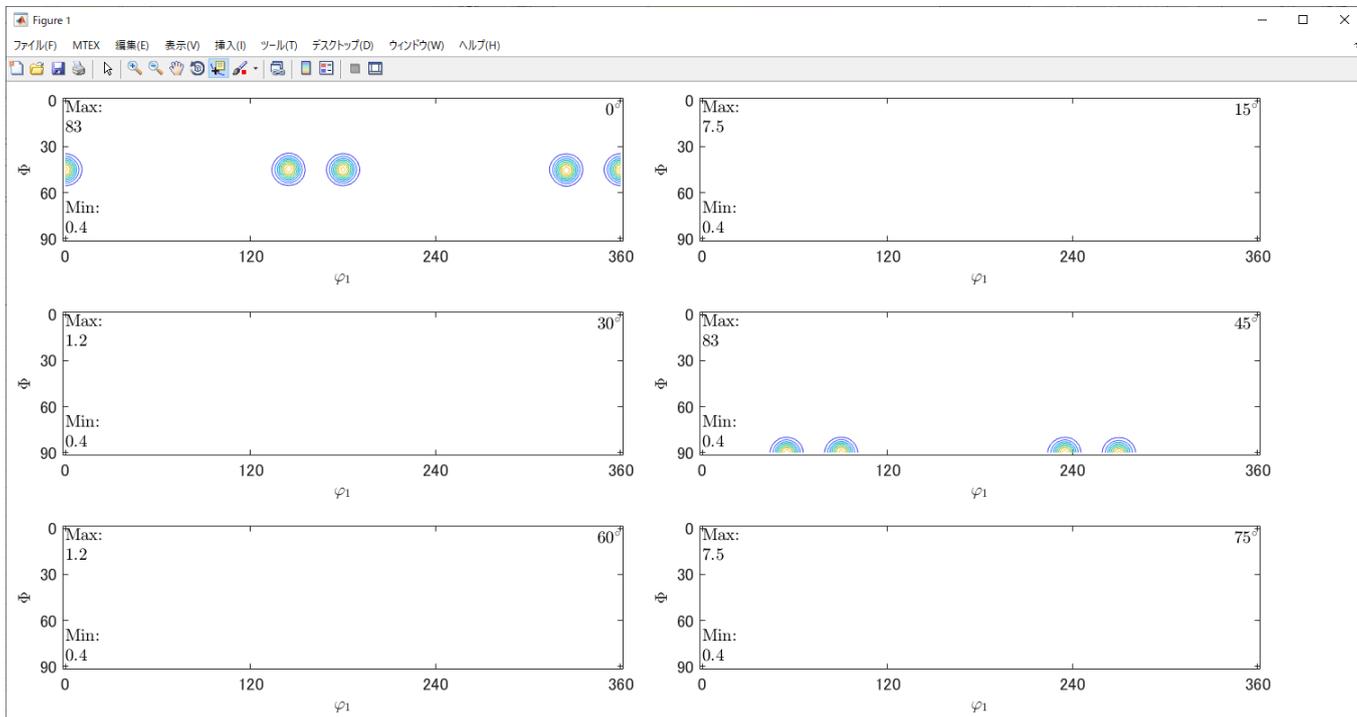
Odf=calcODF(pf)では fwhm=5deg

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°

center: 4936 orientations, resolution: 5°

weight: 0.60142



目標方位密度 5 4 3 に対し、8 3 である。

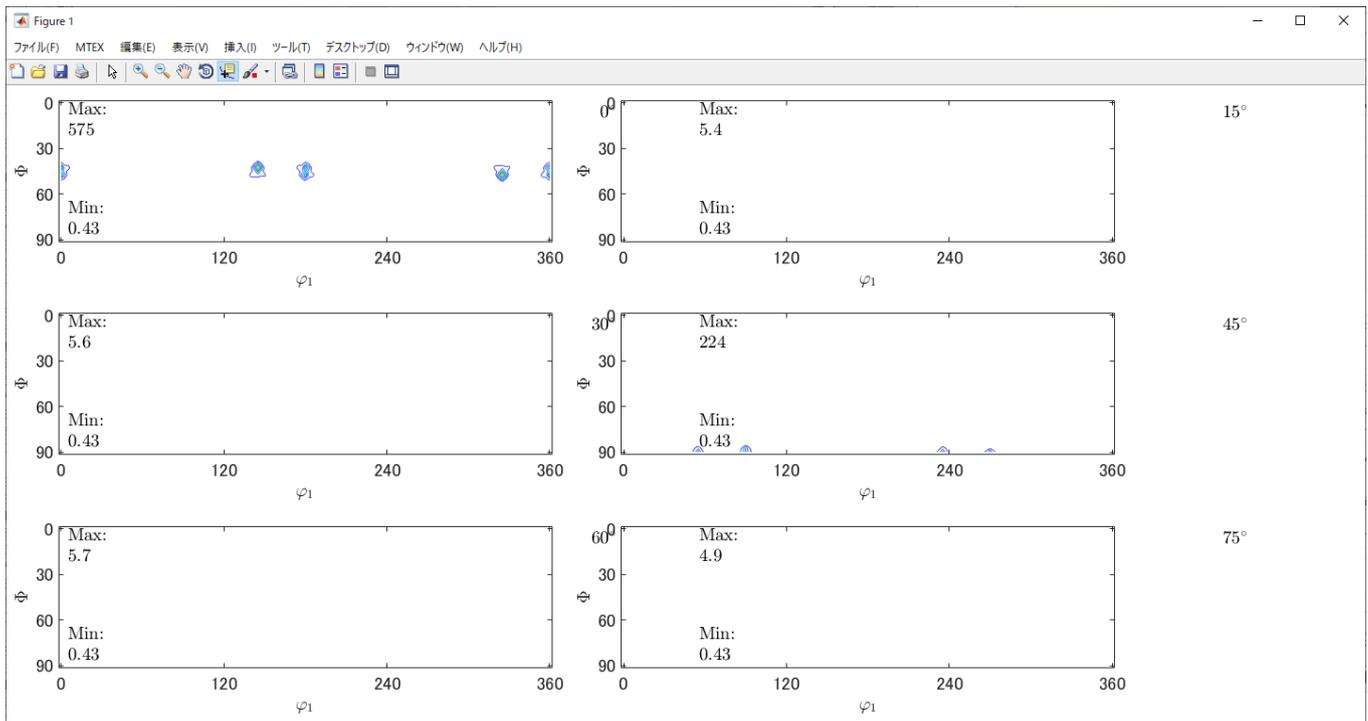
odf2=calcODF(pf,'halfwidth',2*degree)

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 2°

center: 4930 orientations, resolution: 5°

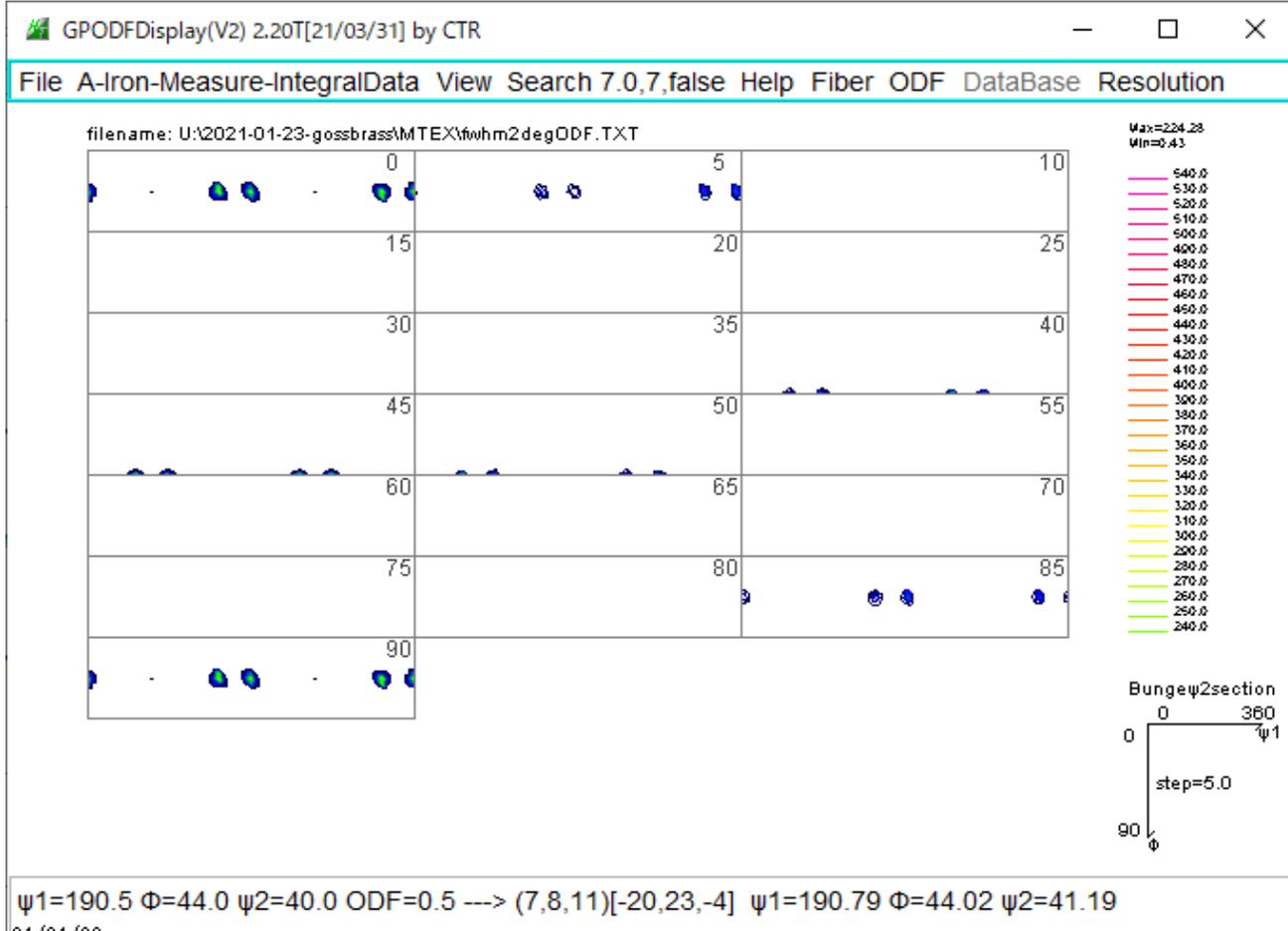
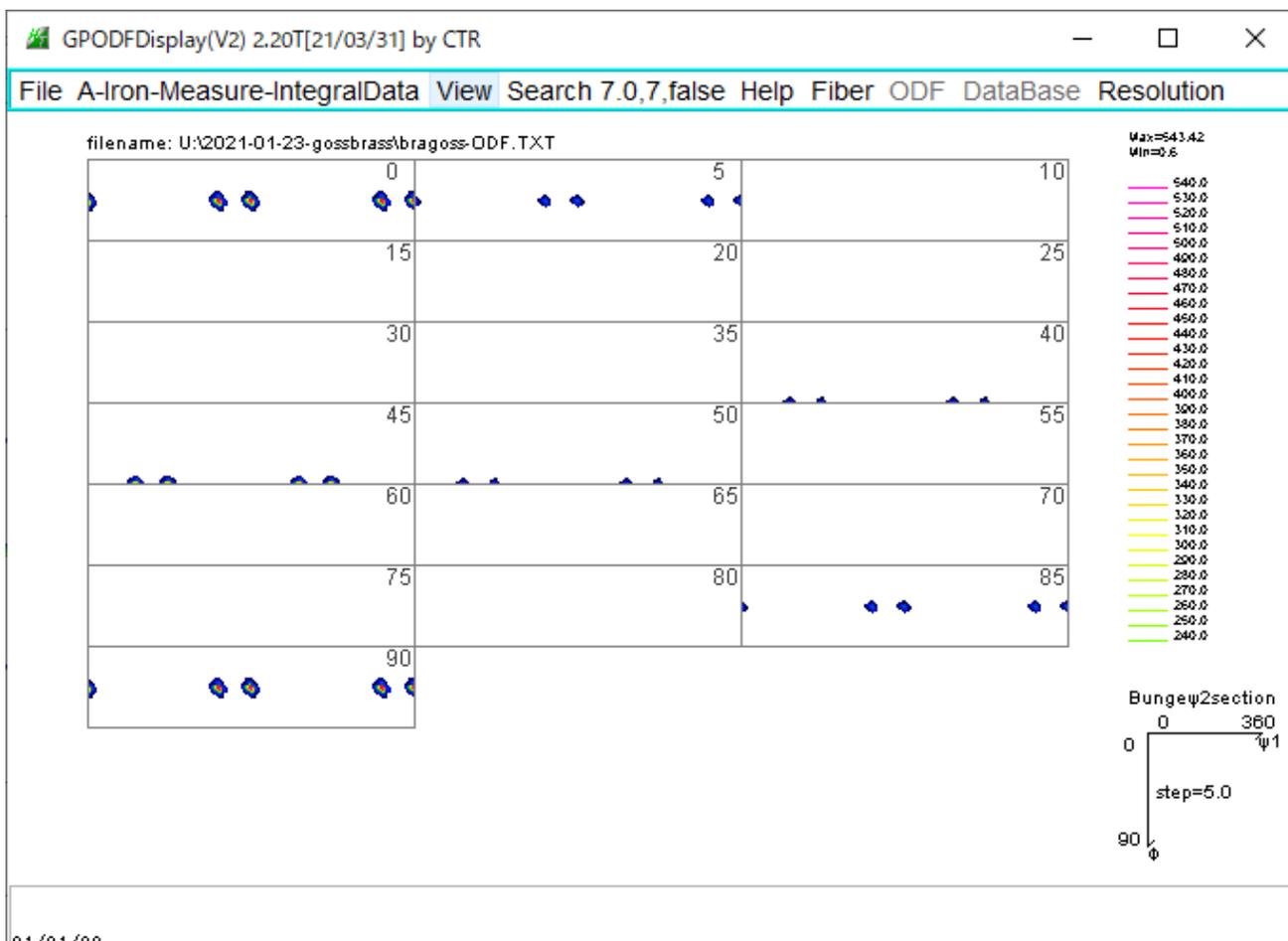
weight: 0.57223



目標値に近い値が得られる。

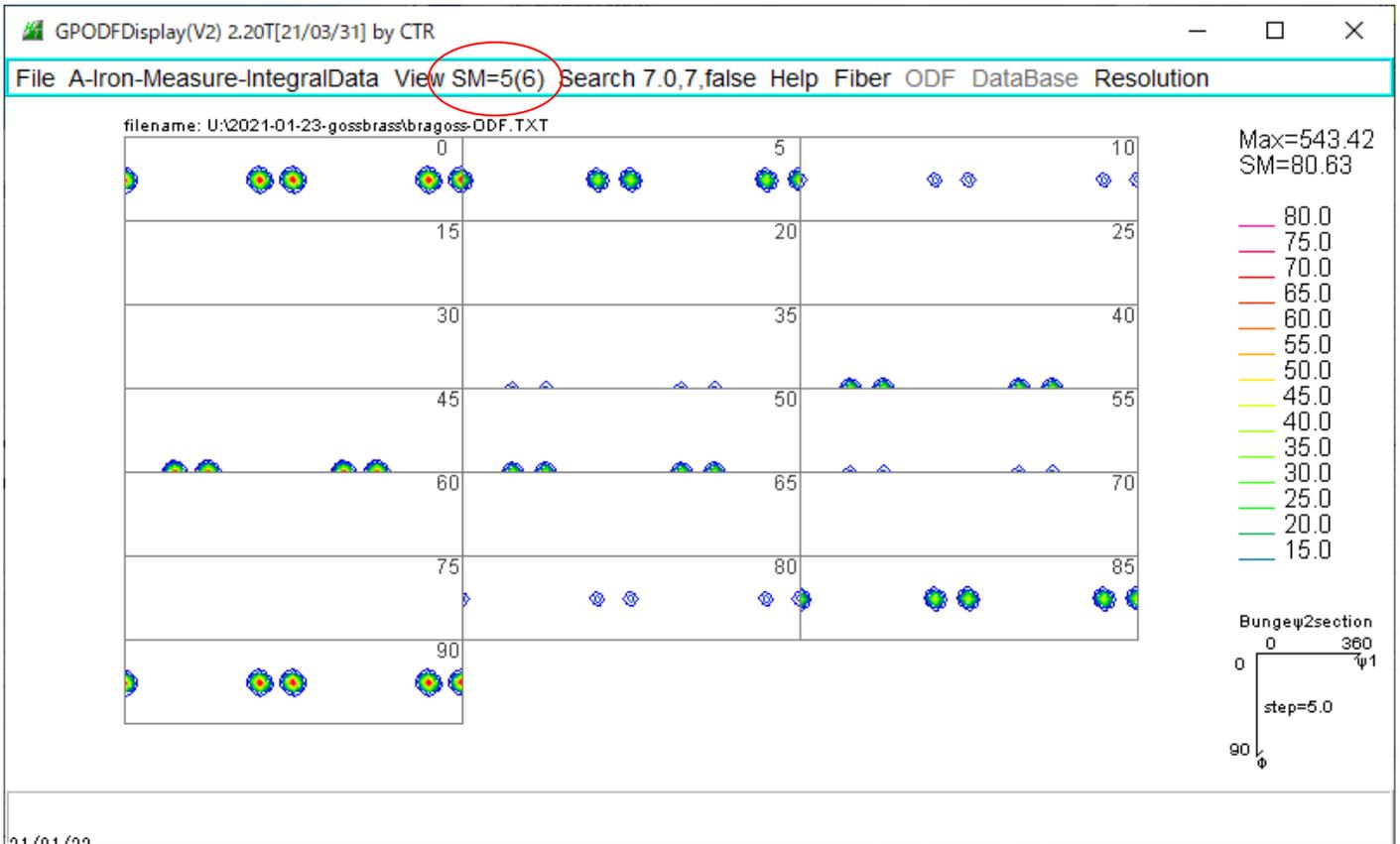
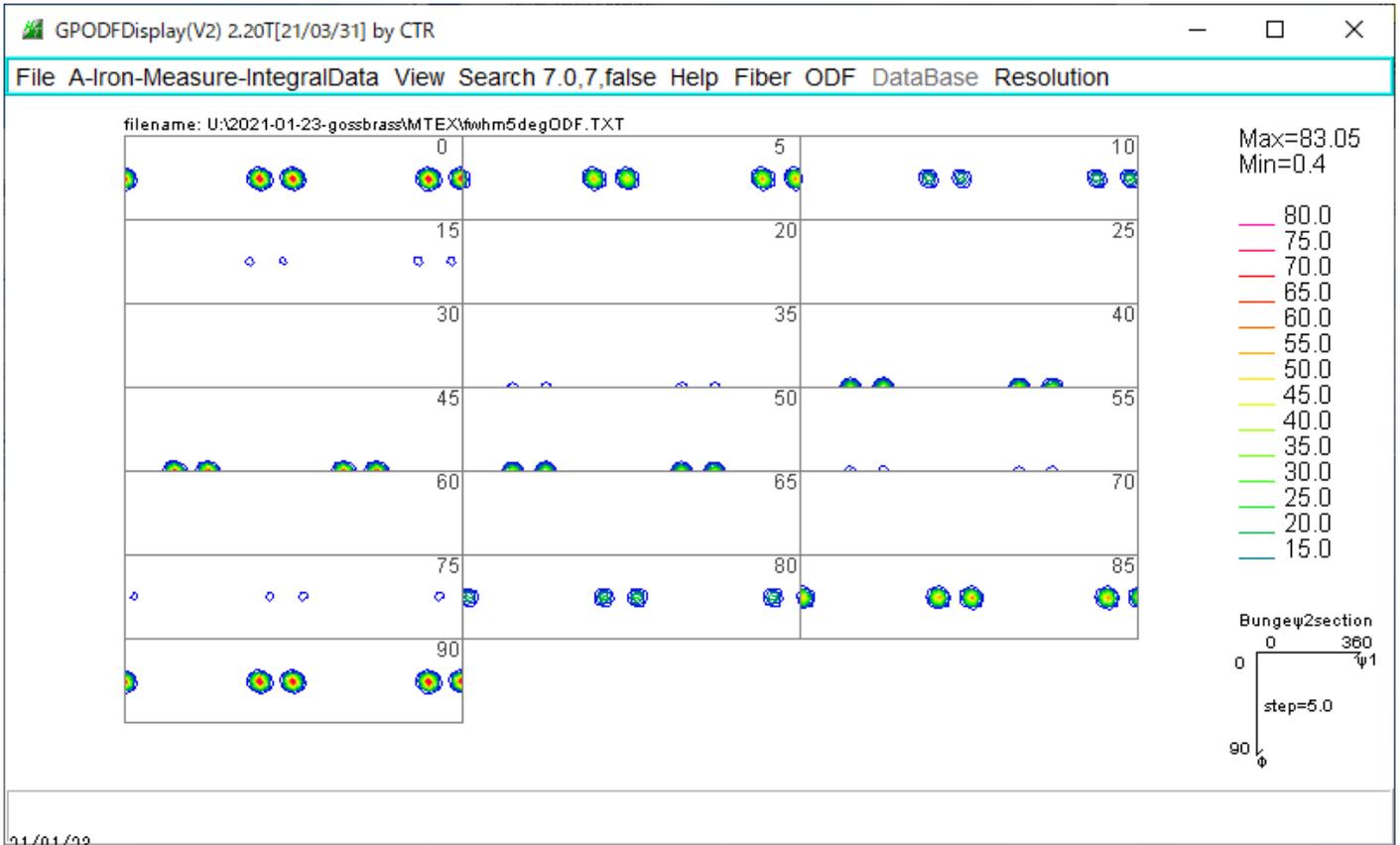
E B S Dと同じ $2 * d e g r e e$ である。

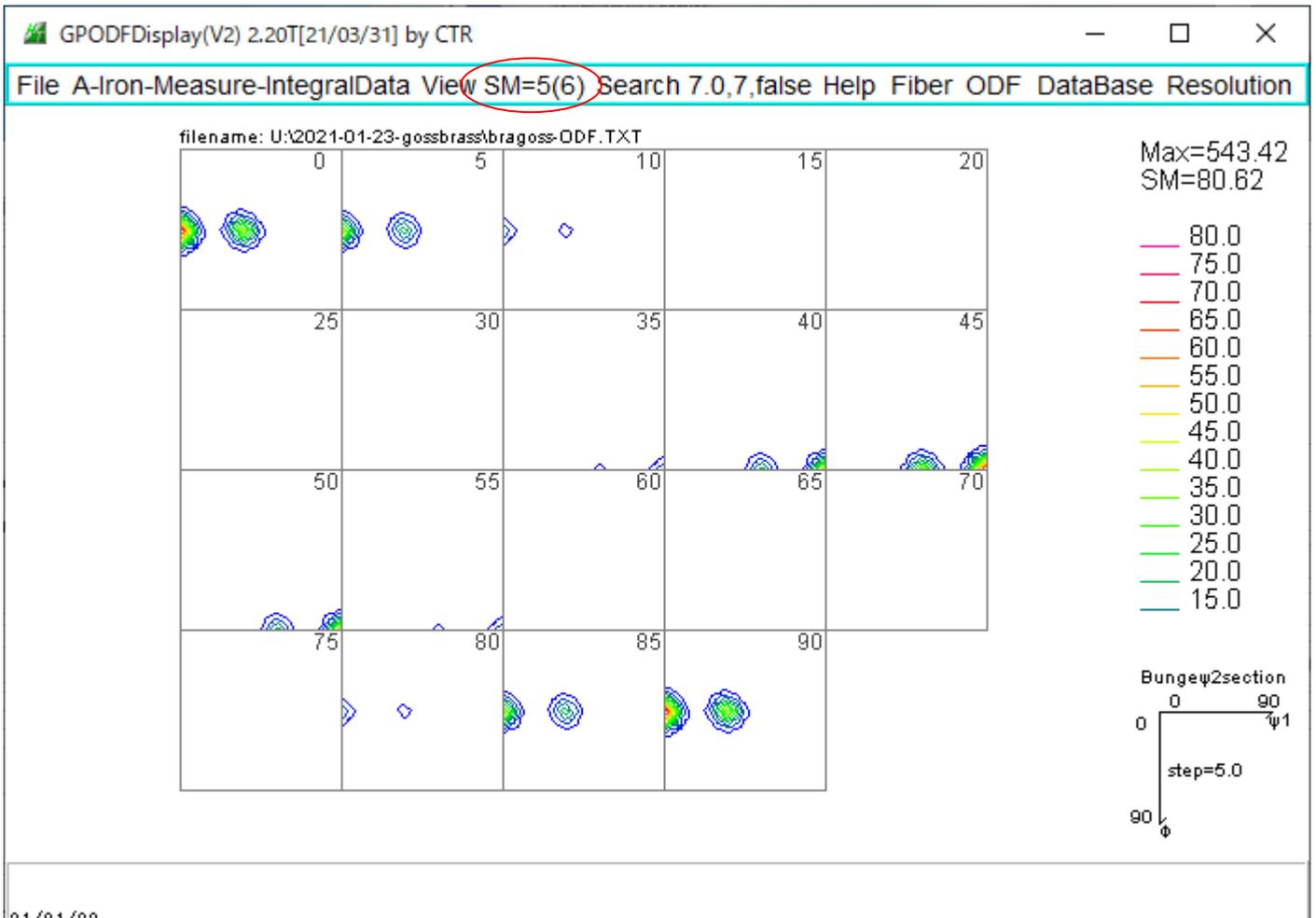
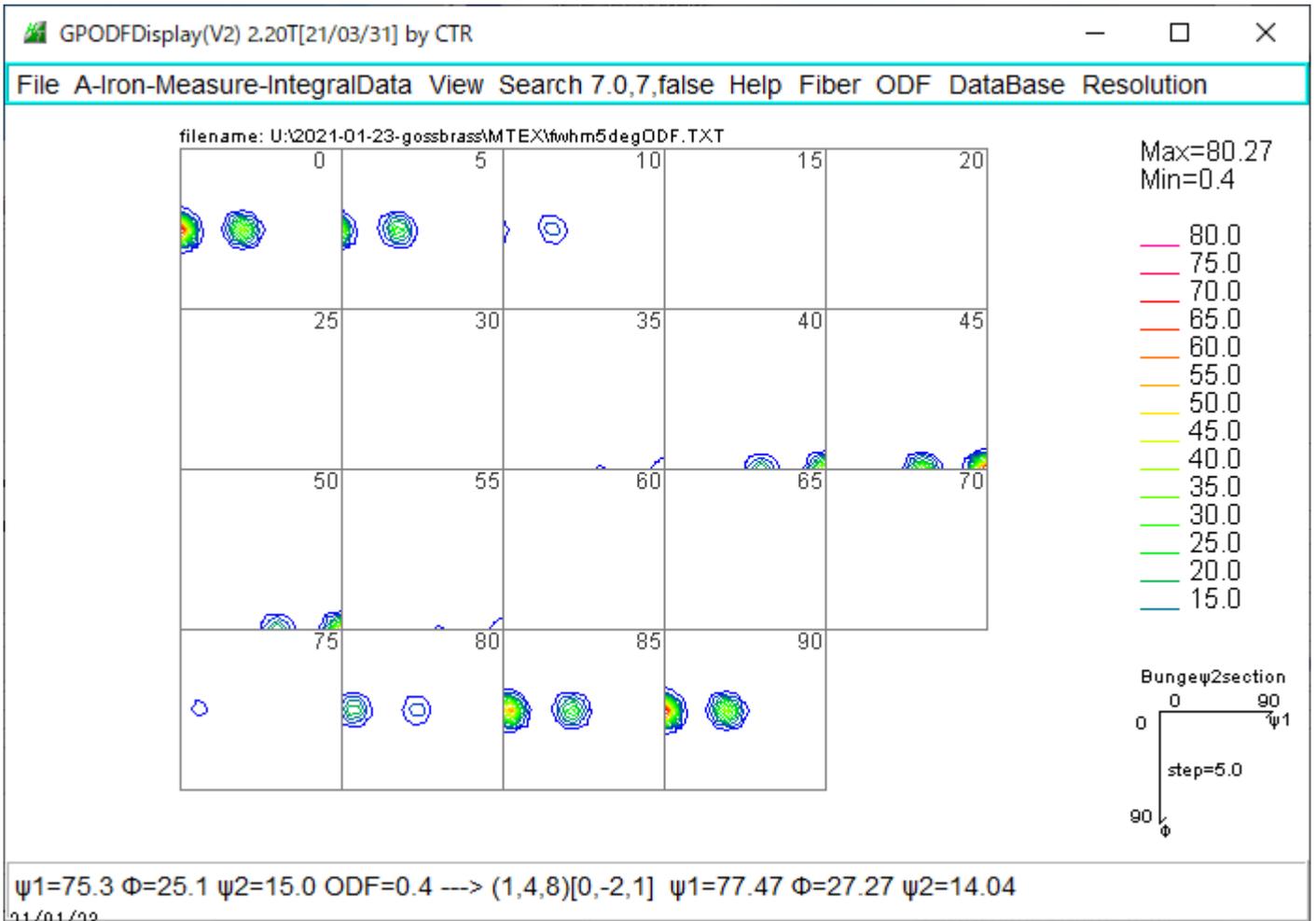
LaTeX(上段)、MTEXで比較(下段)



LaTeXと同一ODF図は fwhm=2 degree で得られます。

逆にMTEXの $fwhm=5\text{ deg}$ の方位密度をLaboTexに結果から得るには
上段がMTEX、下段がLaboTexの平滑化5 (6)





入力データ (半価幅 15 deg)

Model ODF

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

Component No. 1. Component No. 1. Component No. 1.

100.0% 100.0% 100.0%

0.50 FWHM ϕ_1 = 15.00 45.0 0.50 FWHM ϕ = 15.00 45.0 0.50 FWHM ϕ_2 = 15.00 45.0

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ_1	FWHM ϕ	FWHM ϕ_2	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	15.00	15.00	15.00	30 %
2	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	15.00	15.00	15.00	30 %
3	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	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 %

Max. Linearity Background: 40 %

Sample Name: gossbrass15deg30% Project Name: Demo

Cell Parameters (Relative): a: 1.0, b: 1.0, c: 1.0, α : 90.0, β : 90.0, γ : 90.0

Creation of Model ODF Exit

最大方位密度は 5 3

LaboTex - 1E8SD User

File Edit View Calculation Analysis Modelling Help

gossbrass15deg Levels

Max=53.270 Min=0.400 2021.01.24

0 360 ϕ

0 90 ϕ

ODF Container's Info Close

Color No.	Value	Color No.	Value
1	1.0	8	30.1
2	7.0	9	33.4
3	10.3	10	36.7
4	13.6	11	40.1
5	16.9	12	43.4
6	20.2	13	46.7
7	23.5	14	50.0

Dec. Digit: 1 None All Sort

Adjustment of Isolines (Automatic Mode)

Balance: [Slider]

Fill: NORMAL

Background Color: Isoline

AUTOMATIC

ODF Isolines Mode / Load ODF Isolines

Color Value State

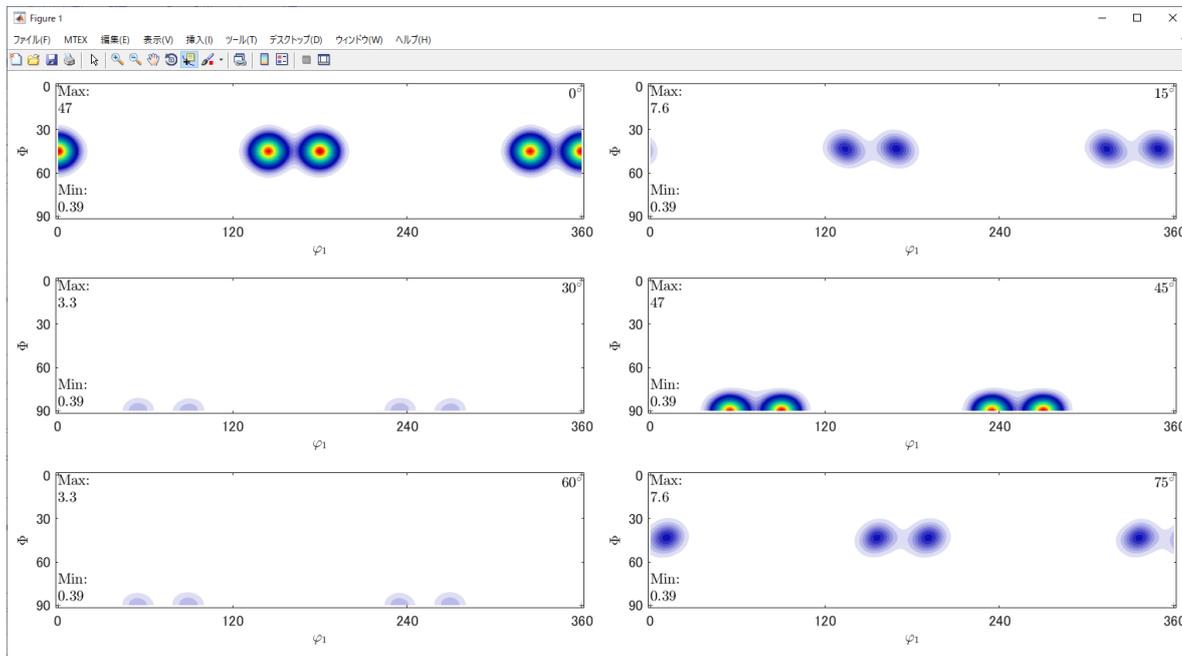
Save ODF Isolines

0-Cubic Demo gossbrass15deg3

MTEXでパラメータ無しのODF計算（5degで計算される）

Radially symmetric portion:
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°
center: 4903 orientations, resolution: 5°
weight: 0.61298

最大方位密度は47で計算される。



半価幅が広いXRDデータの場合、デフォルトのfwhm=5degは適当と考えられる。