

MTEXODF 解析と L a b o T e x ODF 解析の比較

2021年01月03日

HelperTex Office

概要

MTEXのODF解析結果は最大方位密度が低く、丸みを帯びたODF図が表示される。

これは、入力データに関係なく、XRDの場合、半価幅5deg、EBSDの場合、半価幅10degで計算されている為である事が知られている。

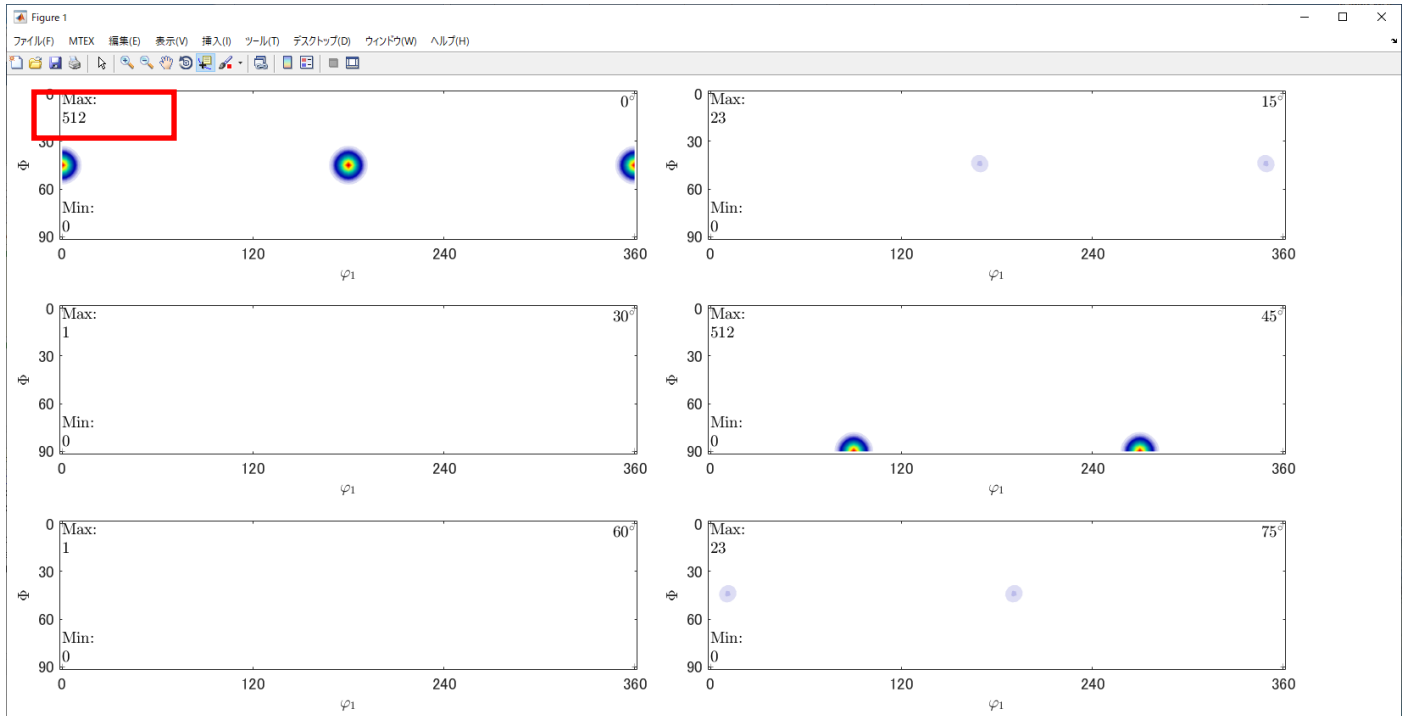
この半価幅は解析前に変更出来るが、不自然な解析方法である。

本資料では、方位のシュミレーションと、ODF解析結果を比較してみます。

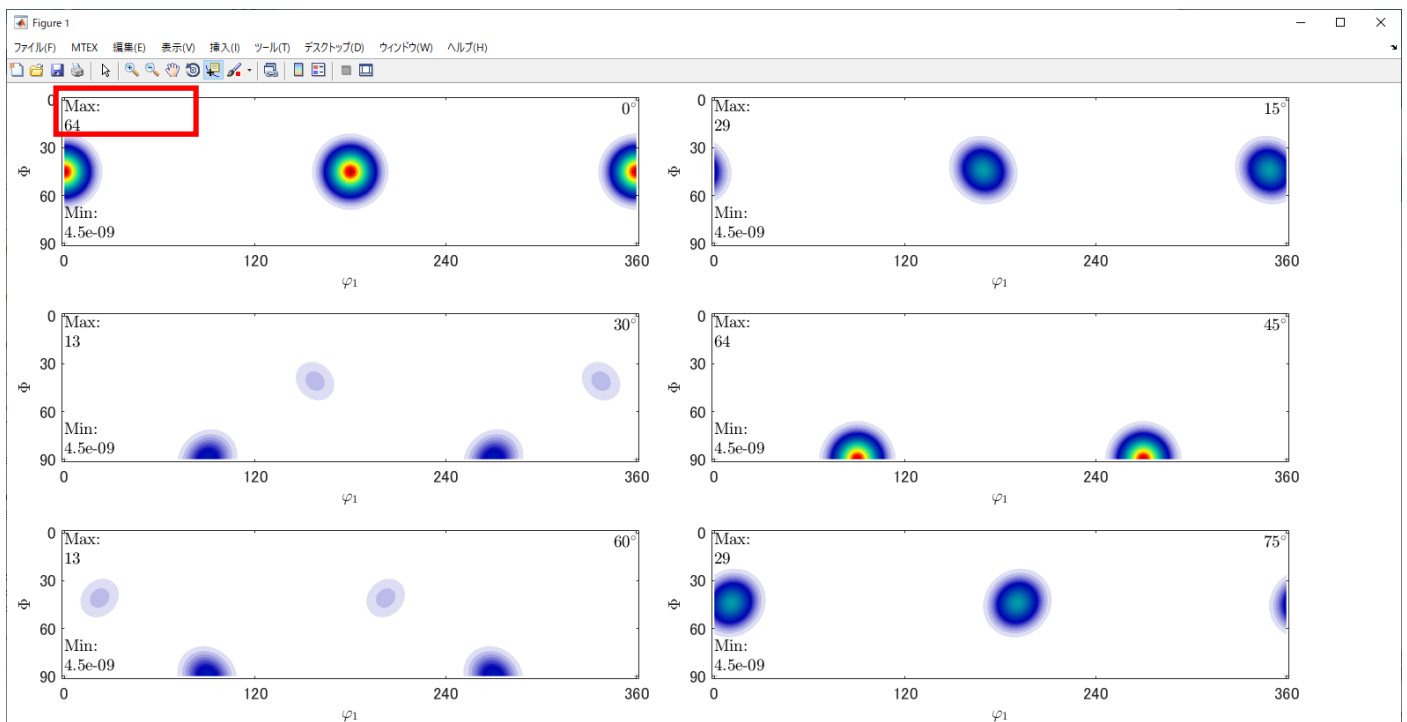
MTEXによるG o s s 方位シミュレーション

```
cs = crystalSymmetry('cubic')
ss = specimenSymmetry('triclinic')
psi = vonMisesFisherKernel('halfwidth',5*degree)
mod1 = orientation.byMiller([1,1,0],[0,0,1],cs,ss)
odf = unimodalODF(mod1,psi)
```

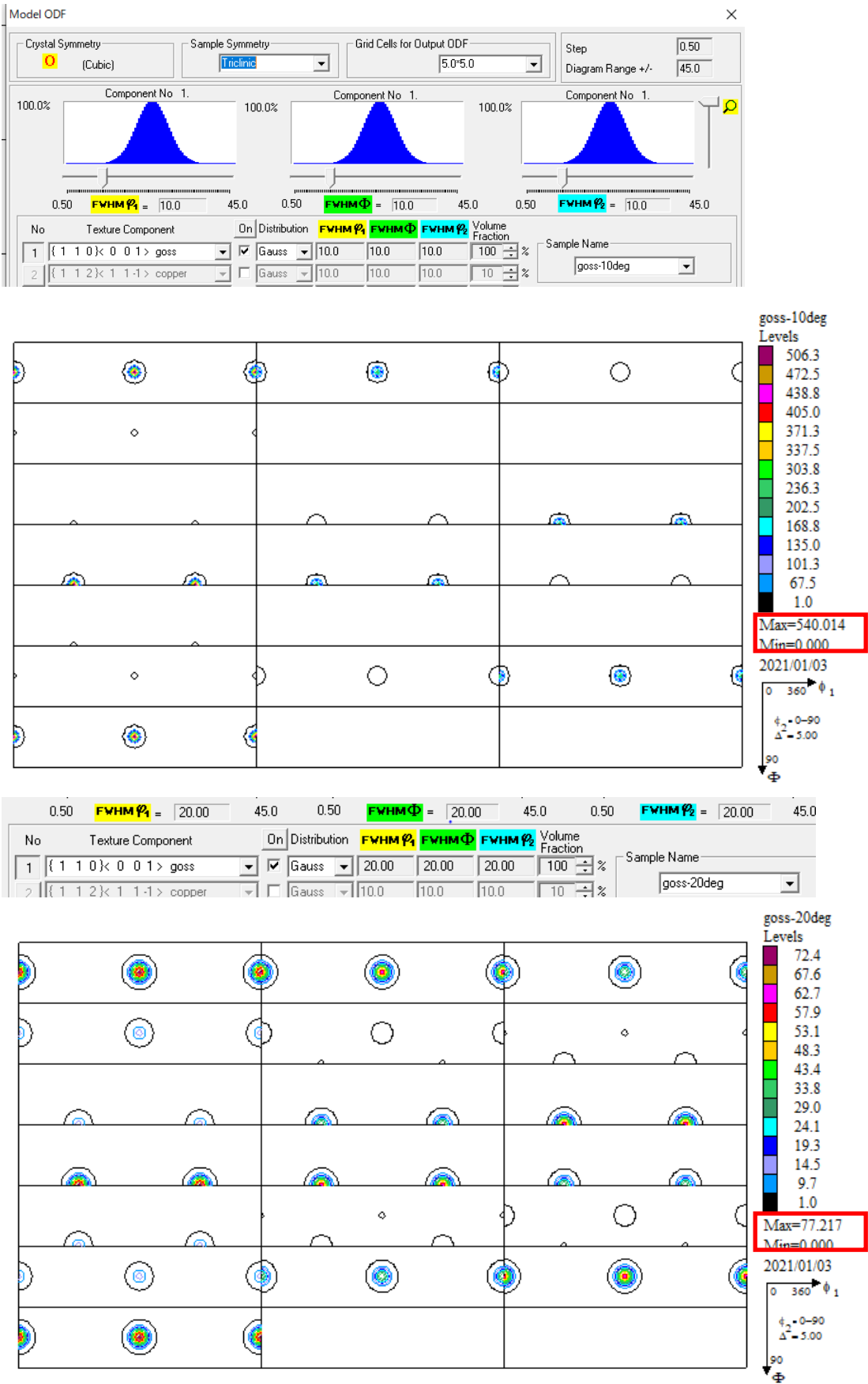
psi = vonMisesFisherKernel('halfwidth',5*degree)の場合



psi = vonMisesFisherKernel('halfwidth',10*degree)



La b o T e xによるG o s s方位シュミレーション



方位密度はほぼ MTEX

La b o T e x

5 d e g 5 1 2

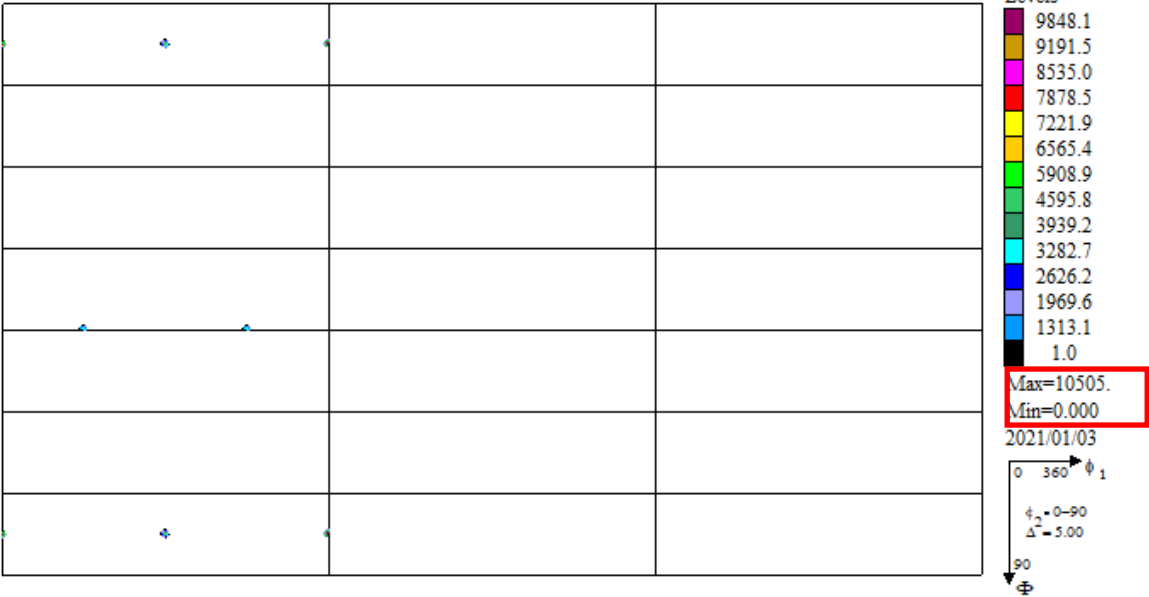
1 0 d e g 5 4 0

1 0 d e g 6 4

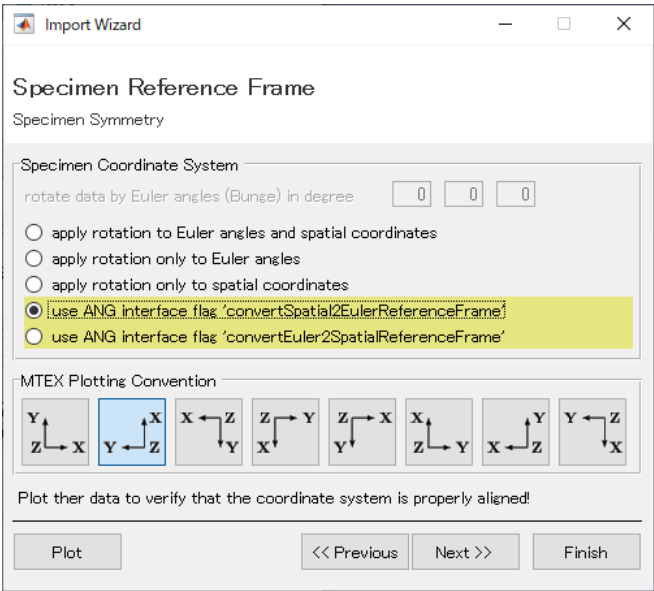
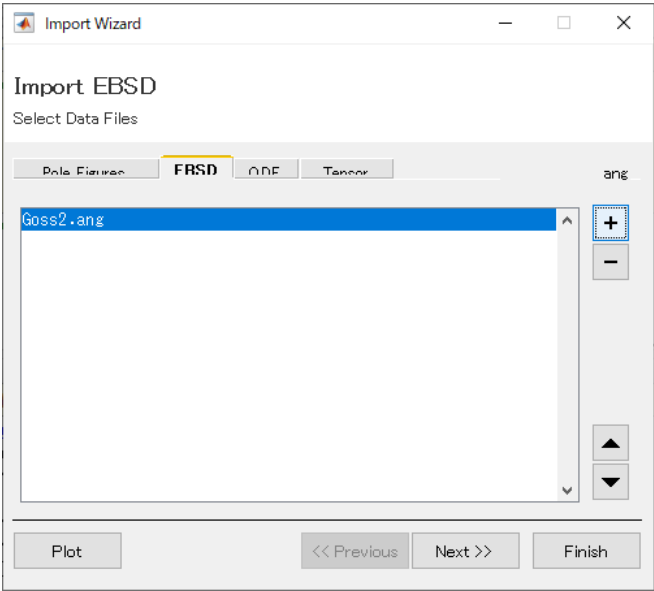
2 0 d e g 7 7

が一致する。

E B S D データ G o s s の単結晶を読み込む
L a b o T e x



M T E X の d e f a u l t の読み込み

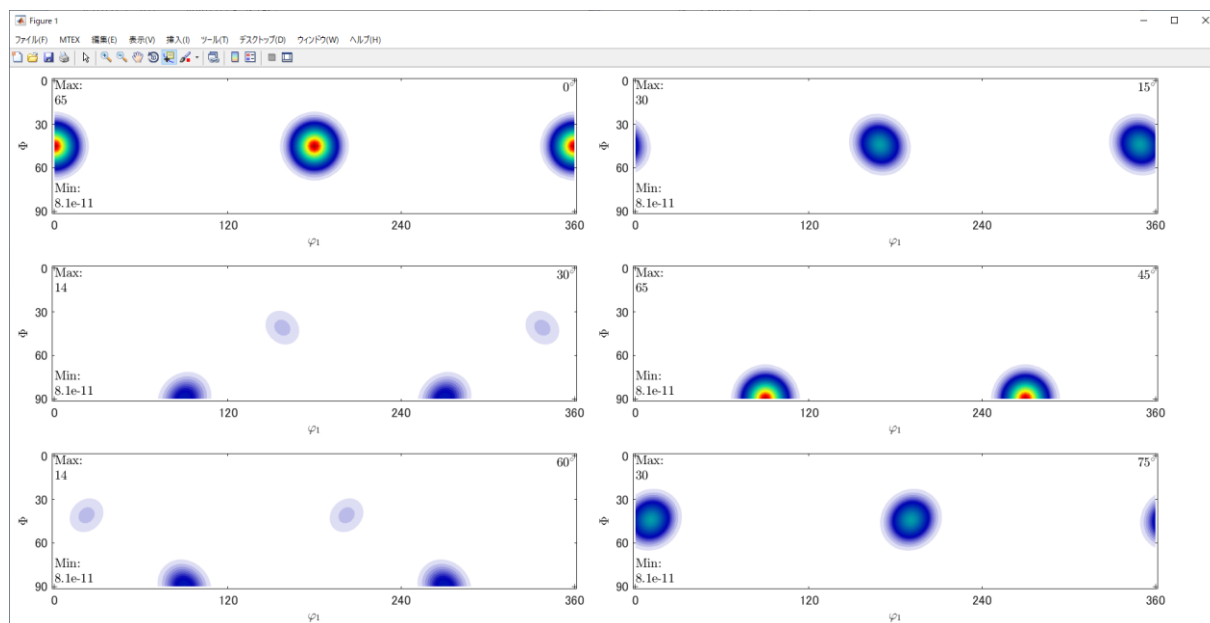


MTEXによるパラメータ default による計算

odf=calcODF(ebsd.orientations)

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

Radially symmetric portion:
kernel: de la Vallée Poussin, halfwidth 10°
center: Rotations: 3 x 1
weight: 1
```



シミュレーション結果の f w h m = 1 0 d e g と一致する。

L a b o T e x では広がりがない方位を計算するが、M T E X は常に広がりをもって計算される。

M T E X 単結晶データ

入力データは、E B S D t o L a b o T e x ソフトウェアで作成

```
0.0      0.78539    0.0      0.00000      0.00000 3844.9  0.086  0      1  2.084
0.0      0.78539    0.0      0.30000      0.00000 3844.9  0.086  0      1  2.084
0.0      0.78539    0.0      0.60000      0.00000 3844.9  0.086  0      1  2.084
```

L a b o T e x 単結晶データ

U:¥2020-12-30-Goss単結晶の密度¥Goss2.ang↓

```
↓
Structure Code      a      b      c      alfa      beta      gamma ↓
7      1.0      1.0      1.0      90.0      90.0      90.0      5.0      1      0      0
0.0      45.264    0.0      1.0↓
0.0      45.264    0.0      1.0↓
0.0      45.264    0.0      1.0↓
```

単結晶データならデータは1行で良いが、M T E X では1行では e r r o r のため、3行で評価した