

極点図、ODF図の方位密度に関して

2022年05月24日

HelperTex Office

概要

極点図やODF図の方位密度は解析手法と材料の特性により異なった値を示します。

解析手法では、

d e f o c u s 補正

解析ODFソフトウェア

材料特性

例えば $\langle 111 \rangle // ND$ の場合

再計算極点図 $\{111\}$ の極点図中心への集中度により値が異なります。

異なったシステム（測定装置、解析法（ODFを含む））では値は異なります。

再現する方法を特定します。

測定システム、光学系を特定（例えばRINT2000、スリット条件）

測定試料サイズ

解析方法としてrandom試料を用いたか、あるいは計算で行ったか特定します。

材料特性

同一 $\langle 111 \rangle$ -Fiberでもその密度により集中度が異なります。

以下に $\langle 111 \rangle$ -FiberのVF%=30%を集中度10degと20degを比較します。

極点図をLaboTexで作成しStandardODFで比較する。

< 1 1 1 > - Fiber VF 30% - FWHM = 10 deg

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

Component No. 1: 100.0% | Component No. 1: 100.0% | Component No. 1: 100.0%

FWHM ϕ_1 = fiber | FWHM Φ = 10.0 | FWHM ϕ_2 = 10.0

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ_1	FWHM Φ	FWHM ϕ_2	Volume Fraction
1	< 1 1 1 > fiber	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	fiber	10.0	10.0	30 %
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 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: VF30-10deg | Project Name: Demo | Cell Parameters (Relative): a: 1.0, b: 1.0, c: 1.0, α : 90.0, β : 90.0, γ : 90.0

Background: 70 %

Creation of Model ODF | Exit

< 1 1 1 > - Fiber VF 30% - FWHM = 20 deg

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

Component No. 1: 100.0% | Component No. 1: 100.0% | Component No. 1: 100.0%

FWHM ϕ_1 = fiber | FWHM Φ = 20.00 | FWHM ϕ_2 = 20.00

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ_1	FWHM Φ	FWHM ϕ_2	Volume Fraction
1	< 1 1 1 > fiber	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	fiber	20.00	20.00	30 %
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 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: VF30-20deg | Project Name: Demo | Cell Parameters (Relative): a: 1.0, b: 1.0, c: 1.0, α : 90.0, β : 90.0, γ : 90.0

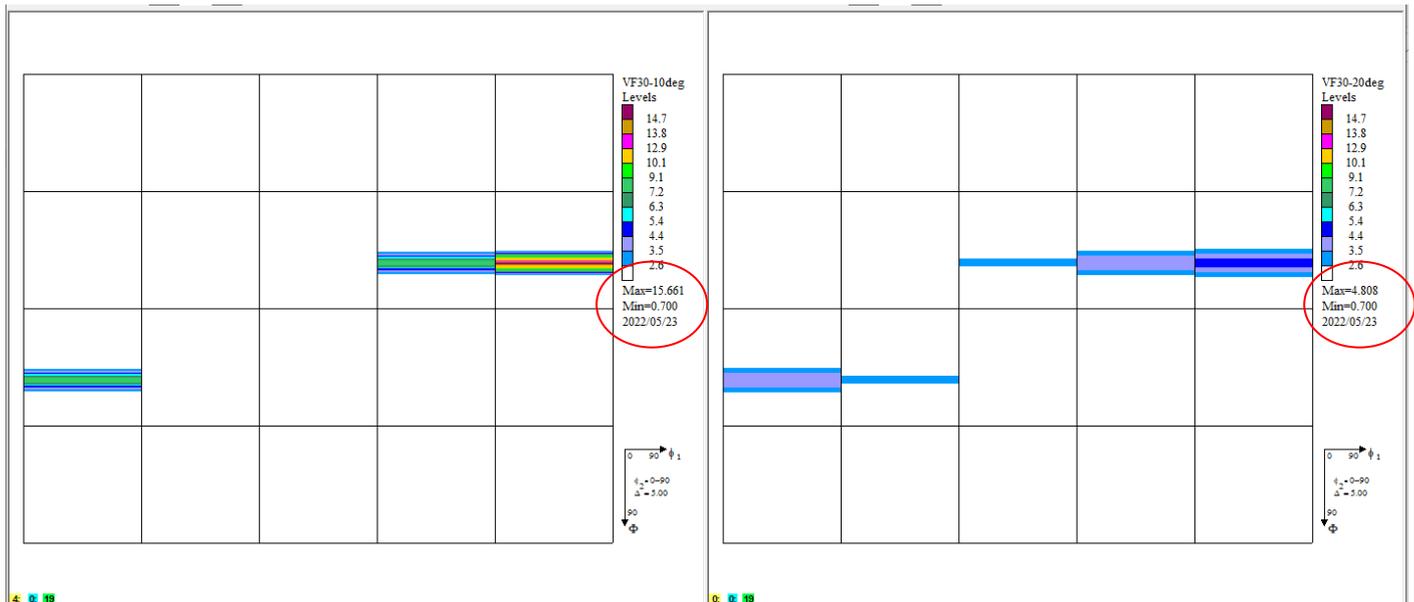
Background: 70 %

Creation of Model ODF | Exit

ODF図比較

FWHM=20deg

FWHM=20deg



Max=15.661
Min=0.700
2022/05/23

Max=4.808
Min=0.700
2022/05/23

Min=0.7 → randomVF%=70%

Min=0.7 → randomVF%=70%

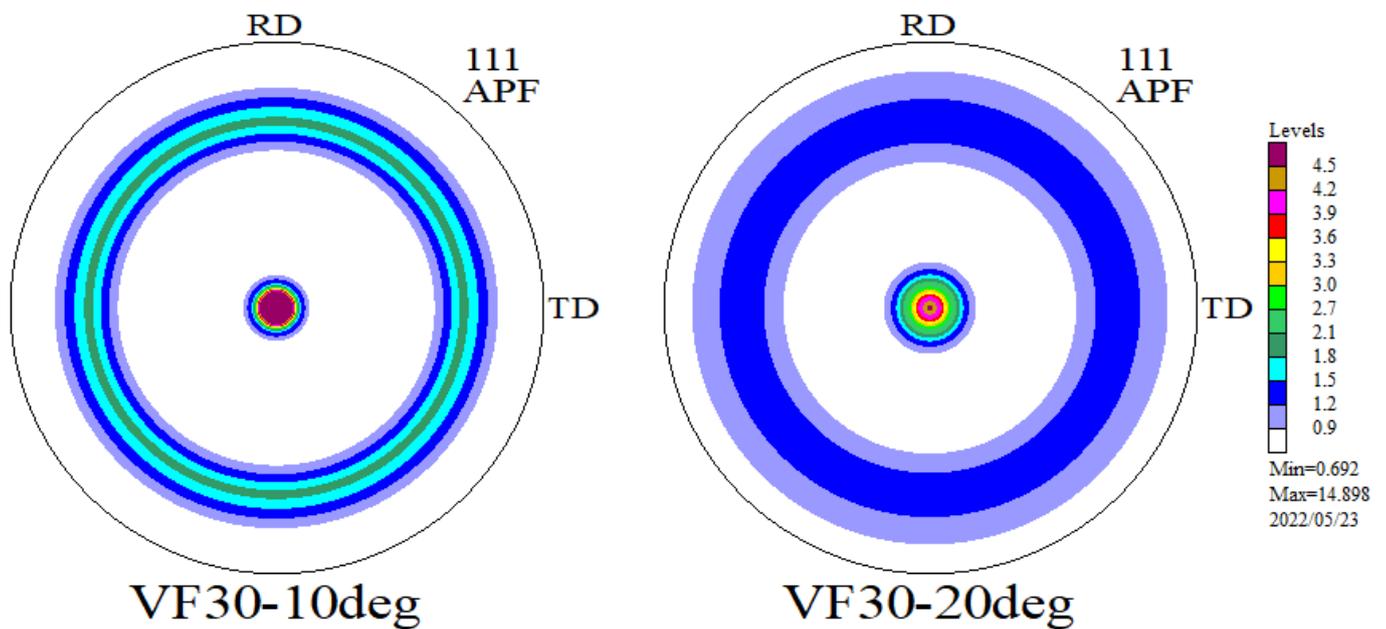
Max=15.66

Max=4.808

ODF解析時Fiberで解析すると15.66と4.808になります。

FWHMによりODF図の広がり異なります、方位密度も異なります。

{111} 極点図比較

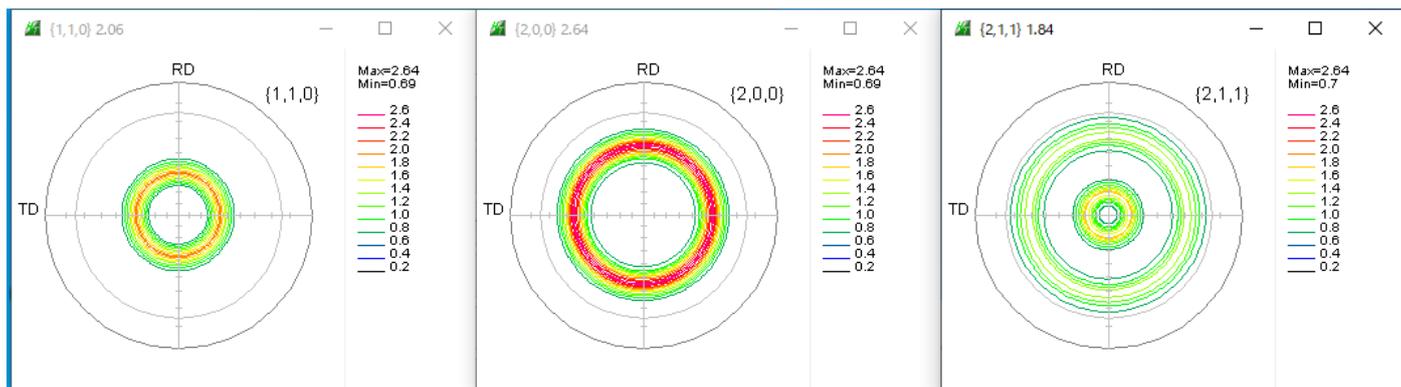


Min=0.692
Max=14.898
2022/05/23

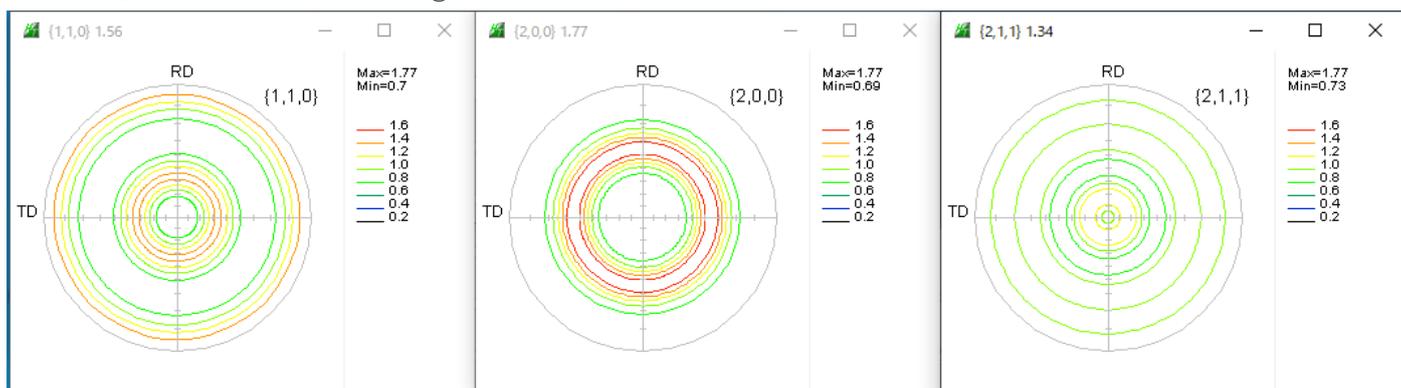
Min=0.696
Max=4.690
2022/05/23

極点図をE X p o r t し、反射極点図に切り出し

V F 3 0 % - F W H M = 1 0 d e g

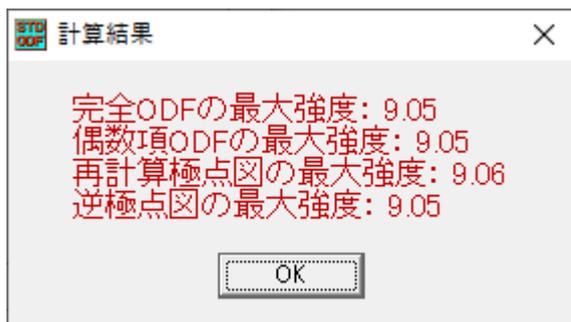


V F 3 0 % - F W H M = 2 0 d e g

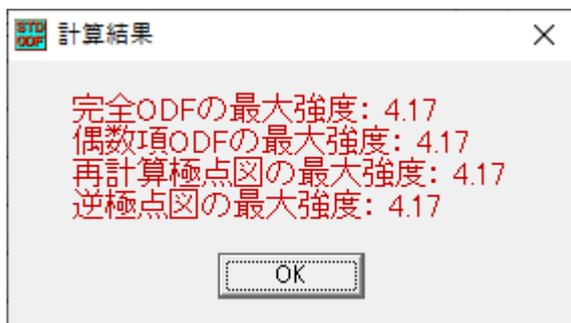


Standard ODFで解析

VF 30% - FWHM = 10 deg

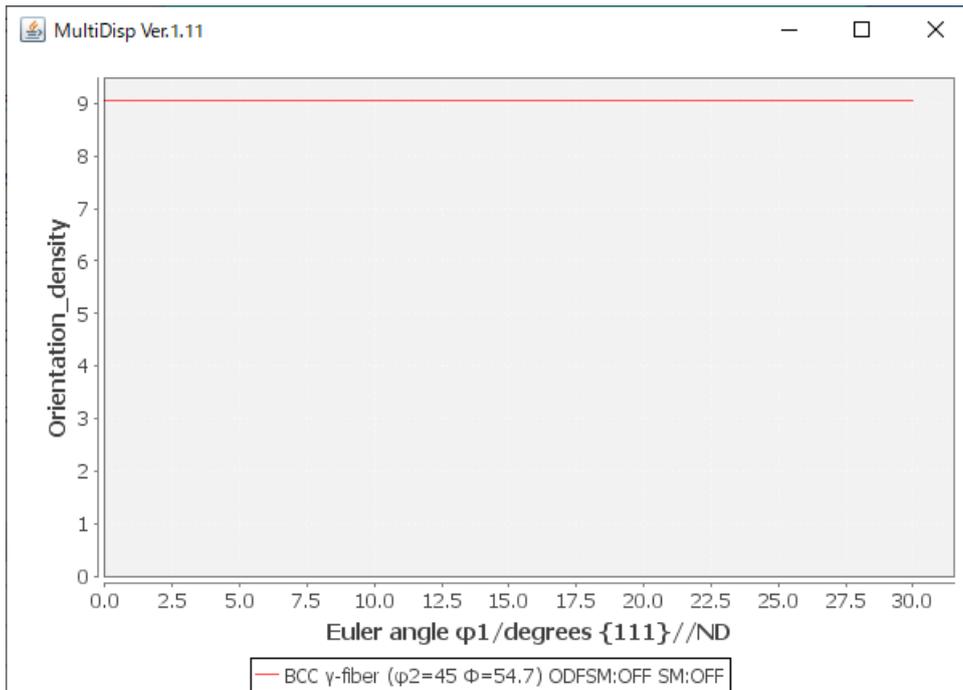
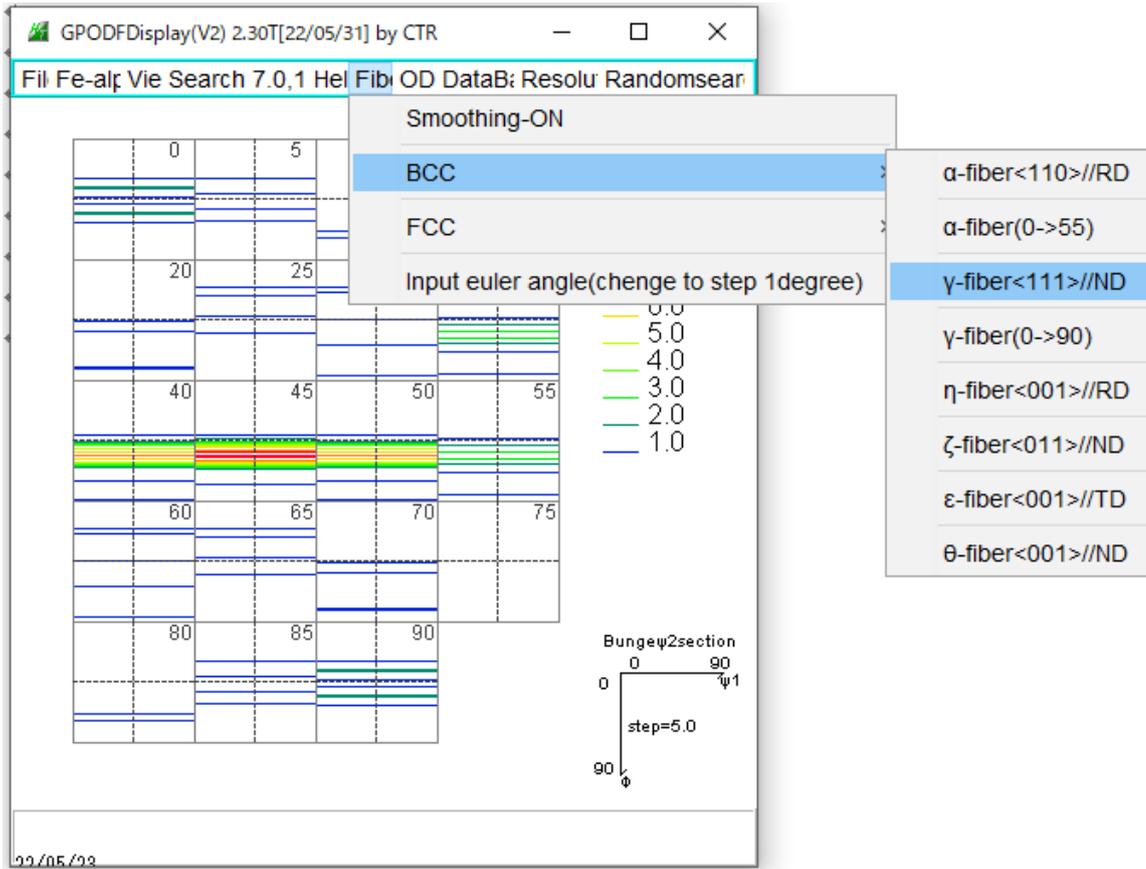


VF 30% - FWHM = 20 deg

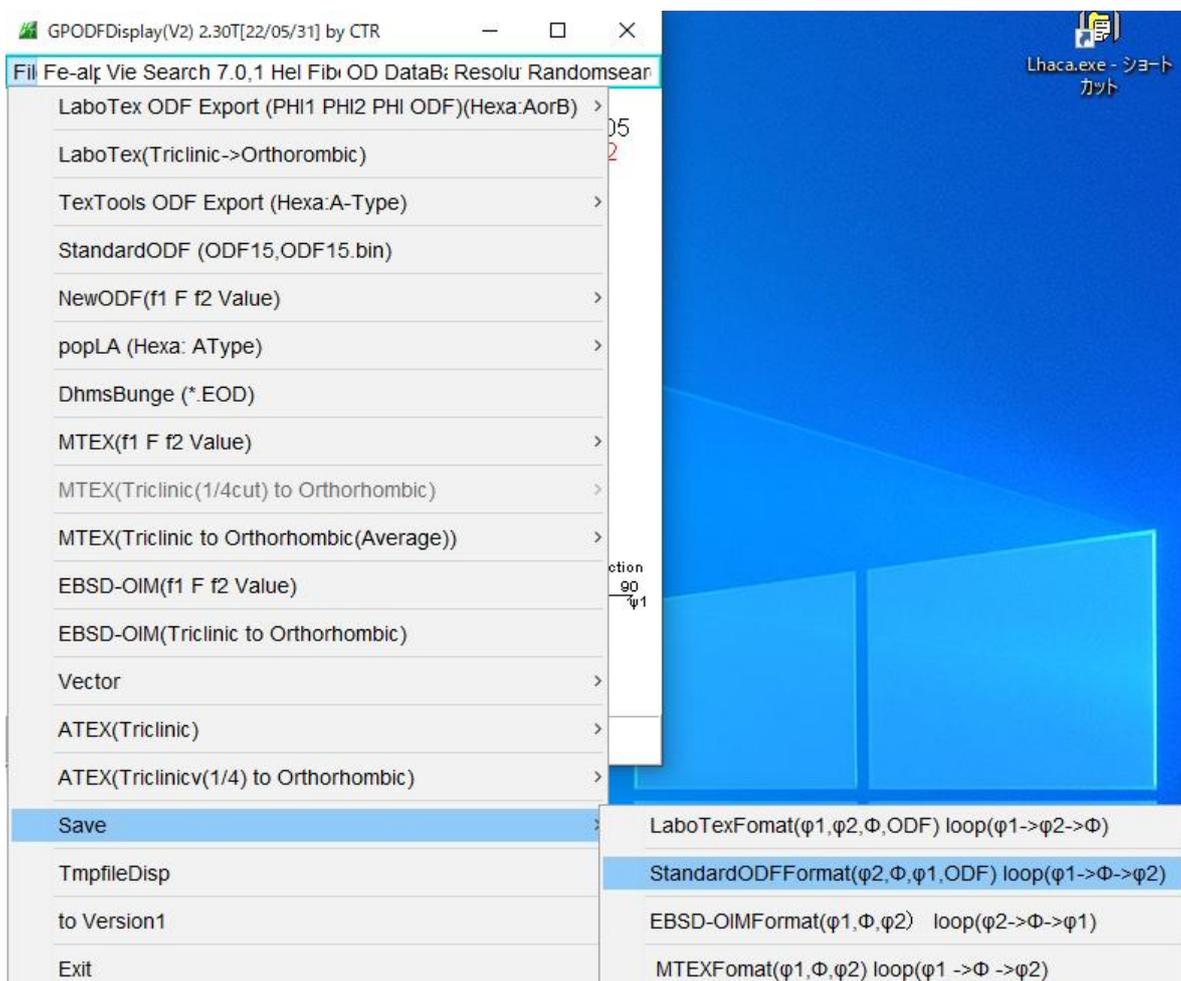


完全なFiberなので、 $\Phi = 55^\circ$ 、 $\phi_2 = 45^\circ$ で ϕ_1 が 0° から 90° までを平均値はそれぞれ、9.05と4.17になります。

$\Phi = 5.5^\circ$ 、 $\phi_2 = 4.5^\circ$ で ϕ_1 が 0° から 90° までを平均値
 VF 30% - FWHM = 10 deg の $\langle 111 \rangle // ND$ は

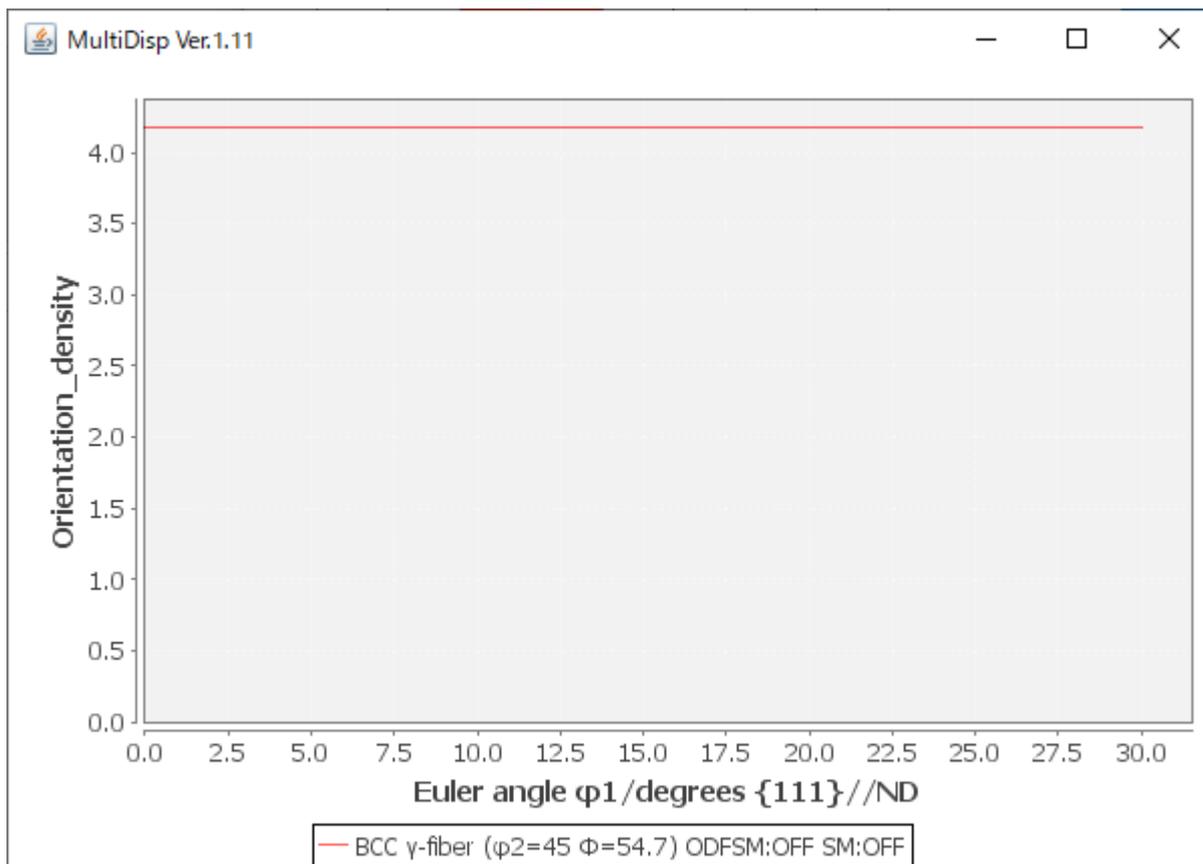
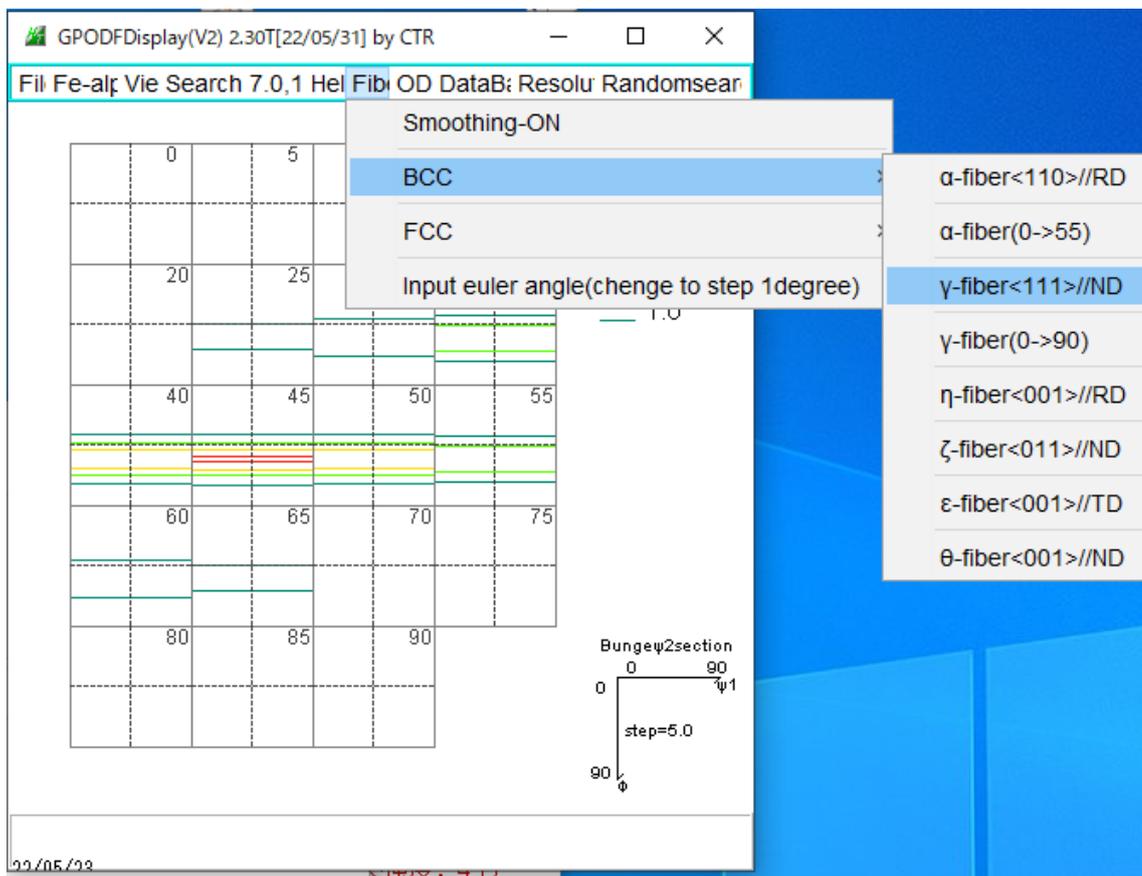


TEXTデータのExport



3458	45	50	85	6.662261	
3459	45	50	90	6.662261	
3460	45	55	0	9.046195	
3461	45	55	5	9.046195	
3462	45	55	10	9.046196	
3463	45	55	15	9.046196	
3464	45	55	20	9.046196	
3465	45	55	25	9.046196	
3466	45	55	30	9.046196	
3467	45	55	35	9.046196	
3468	45	55	40	9.046196	
3469	45	55	45	9.046196	
3470	45	55	50	9.046196	
3471	45	55	55	9.046195	
3472	45	55	60	9.046195	
3473	45	55	65	9.046195	
3474	45	55	70	9.046196	
3475	45	55	75	9.046196	
3476	45	55	80	9.046196	
3477	45	55	85	9.046196	
3478	45	55	90	9.046196	
3479	45	60	0	5.999894	
3480	45	60	5	5.999894	
3481	45	60	10	5.999895	

V F 3 0 % - F W H M = 2 0 d e g の $\langle 111 \rangle // ND$ は



3459	45	50	90	3.69068
3460	45	55	0	4.171534
3461	45	55	5	4.171534
3462	45	55	10	4.171534
3463	45	55	15	4.171534
3464	45	55	20	4.171534
3465	45	55	25	4.171534
3466	45	55	30	4.171534
3467	45	55	35	4.171534
3468	45	55	40	4.171534
3469	45	55	45	4.171534
3470	45	55	50	4.171534
3471	45	55	55	4.171534
3472	45	55	60	4.171534
3473	45	55	65	4.171534
3474	45	55	70	4.171534
3475	45	55	75	4.171534
3476	45	55	80	4.171534
3477	45	55	85	4.171534
3478	45	55	90	4.171534
3479	45	60	0	3.56309

まとめ

材料の $\langle 111 \rangle // ND$ の方位密度は、

random補正を行った極点図 $\{110\}$, $\{200\}$, $\{211\}$ 極点図のODF解析から
 γ -Fiberの平均値から求められます。 $\phi 1 = 0 \rightarrow 30 \text{ deg}$

この計算を $\phi 1 = 0 \rightarrow 90$ でも同じような値が得られると思います。

ODF図には

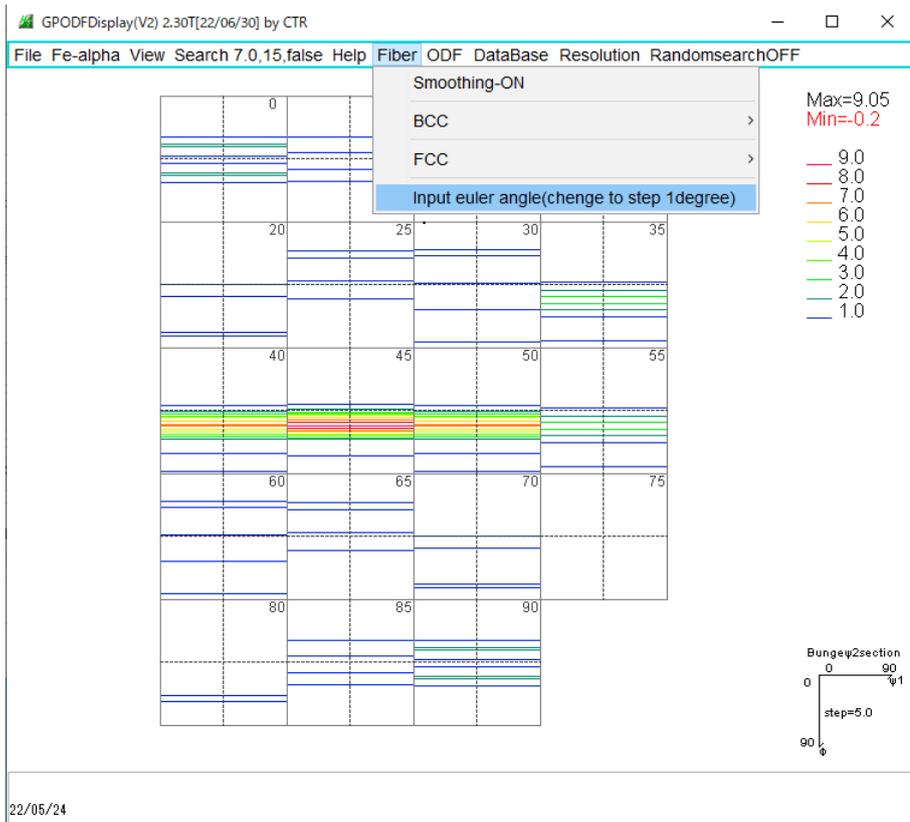
方位の位置により $\{hkl\} \langle uvw \rangle$

方位の広がり (euler角度の広がり)

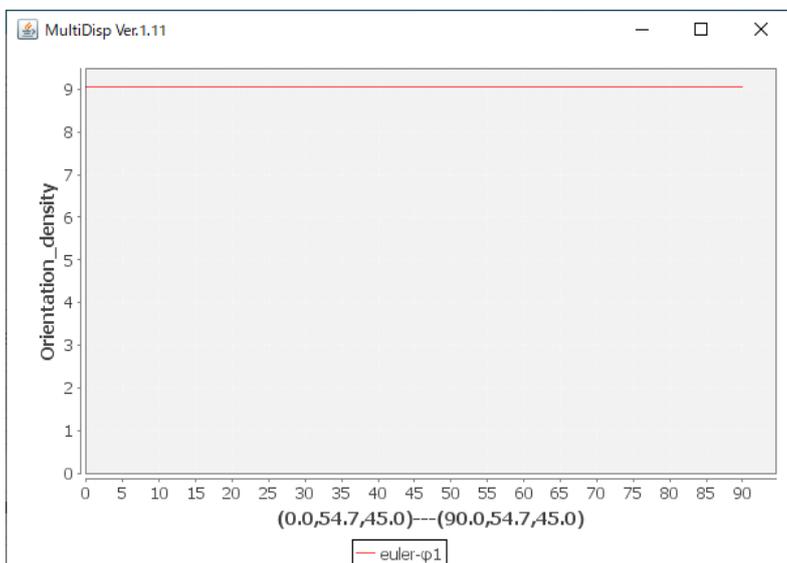
random% (StandardODFでは計算できていない)

が計算されています。

< 1 1 1 > // ND の計算 (F i b e r の切り出し)



22/05/24



GPODFDisplay に読み込んだ ODF15 のホルダに F i b e r ホルダが作成されデータが登録されています。

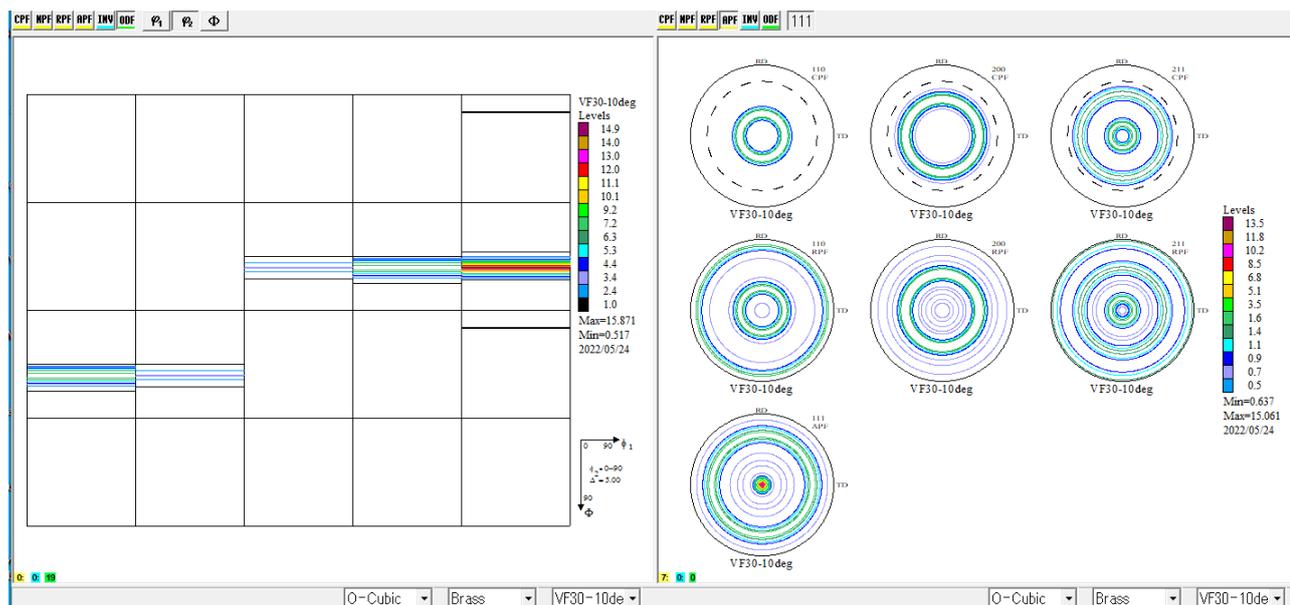
名前	更新日時	種類	サイズ
BCC-Gamma-fiber30-ODFSMOFF-SMOFF...	2022/05/23 16:01	テキスト文書	1 KB
(0,0,55,0,45,0)---(90,0,55,0,45,0).TXT	2022/05/24 2:37	テキスト文書	1 KB
(0,0,54,7,45,0)---(90,0,54,7,45,0).TXT	2022/05/24 2:40	テキスト文書	1 KB

```
euler-φ Intensity↓
0.0 9.046195030212402↓
5.0 9.046195030212402↓
10.0 9.046195983886719↓
15.0 9.046195983886719↓
20.0 9.046195983886719↓
25.0 9.046195983886719↓
30.0 9.046195983886719↓
35.0 9.046195983886719↓
40.0 9.046195983886719↓
45.0 9.046195983886719↓
50.0 9.046195983886719↓
55.0 9.046195030212402↓
60.0 9.046195030212402↓
65.0 9.046195030212402↓
70.0 9.046195983886719↓
75.0 9.046195983886719↓
80.0 9.046195983886719↓
85.0 9.046195983886719↓
90.0 9.046195983886719↓
[EOF]
```

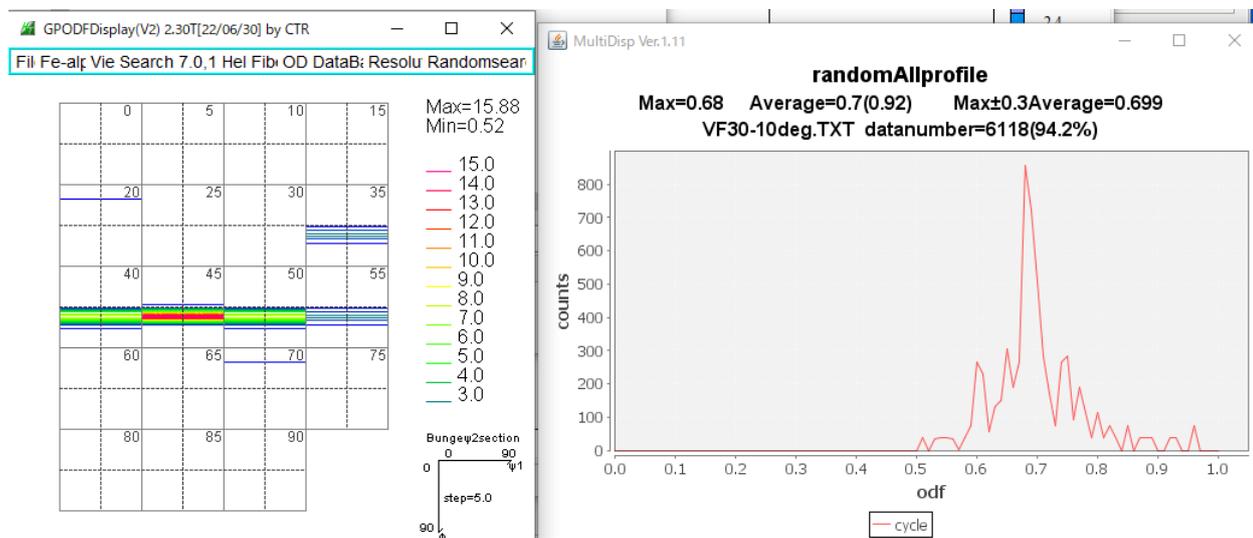
このデータをExcelで読み込み加算平均が行えます。

LaTeXで不完全極点図から random%を計算

VF30%-10deg



ODFを Export し、GPODFDisplay で random%を計算



LaTeXで random 70%の完全極点図を反射極点図 (0 → 75) で randomは68%を計算