

T i t a n i u m

MTEXにより作成された極点図からVolumeFraction計算

2023年01月29日

HelperTex Office

1. 概要

Hexagonalの表現はODFソフトウェアにより異なり複雑である。

本資料では、MTEXにより作成されたTitanium反射極点図から各種ODFソフトウェア方位の定量を行ってみます。

2. MTEXでTitaniumの極点図作成

2.1 Titaniumの(-1 2 5) [2 1 0] 方位作成

```
CS = crystalSymmetry('6/mmm', [2.95 2.95 4.686], 'X||a*', 'Y||b', 'Z||c*', 'mineral', 'Titanium')
```

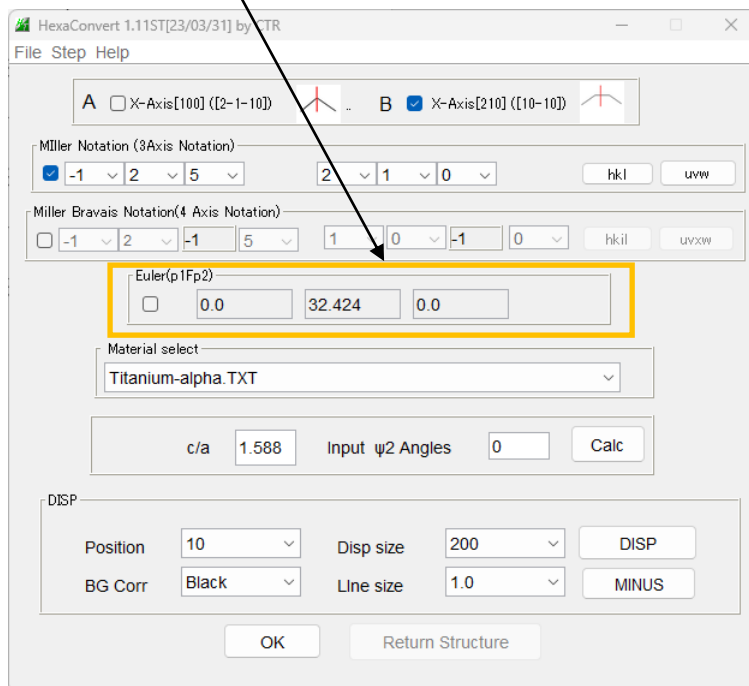
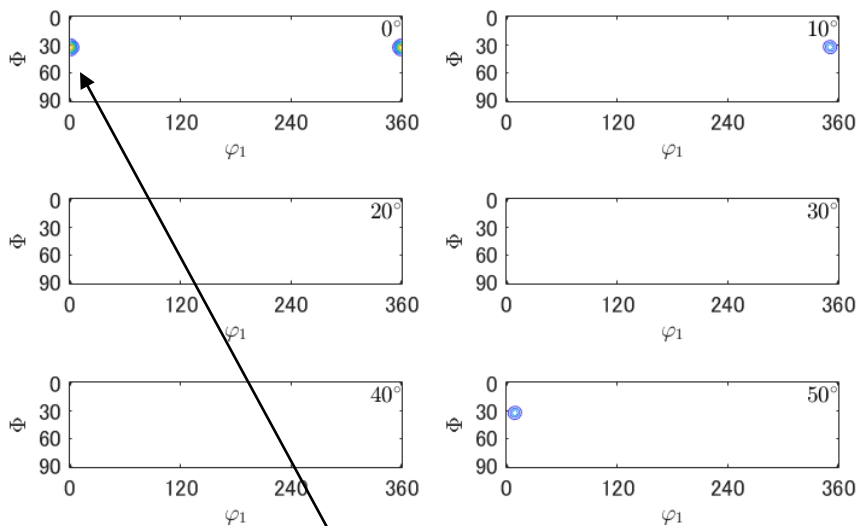
```
SS = specimenSymmetry('1')
```

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

```
randomODF = uniformODF(CS,SS)
```

```
Ori1 = orientation.byMiller([-1 2 5],[2 1 0],CS)
```

```
ODF=0.8* unimodalODF(Ori1,psi)+0.2*randomODF
```

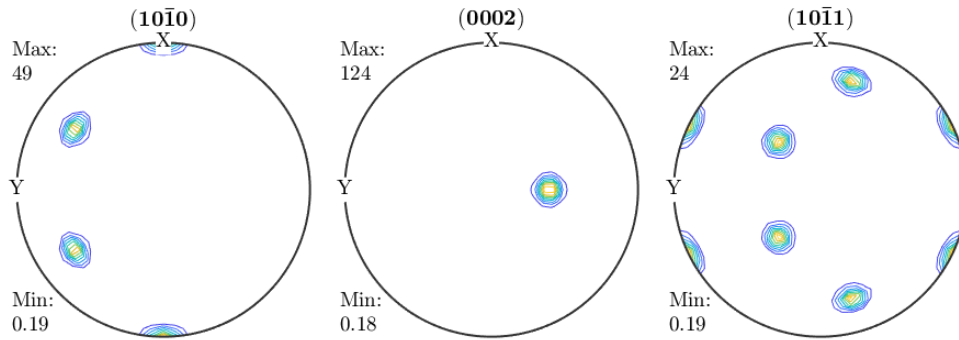


計算される euler 角度は B T y p e と一致する。

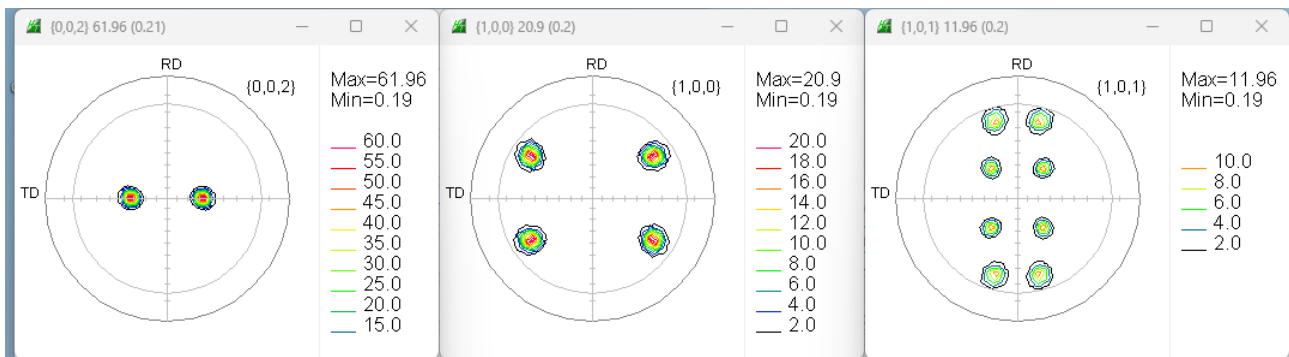
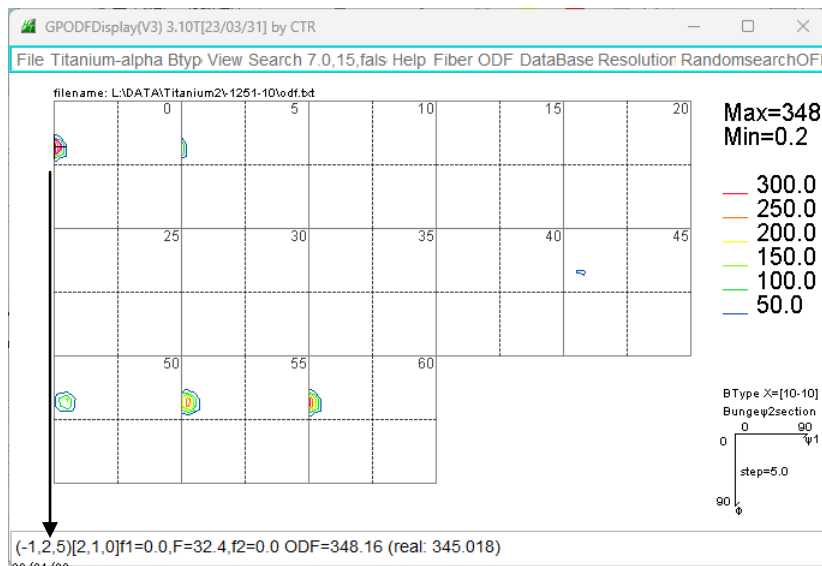
2. 2 極点図作成

$h = \{\text{Miller}(1,0,0,CS), \text{Miller}(0,0,2,CS), \text{Miller}(1,0,1,CS)\}$

$\text{rpf} = \text{calcPoleFigure}(\text{ODF}, h)$

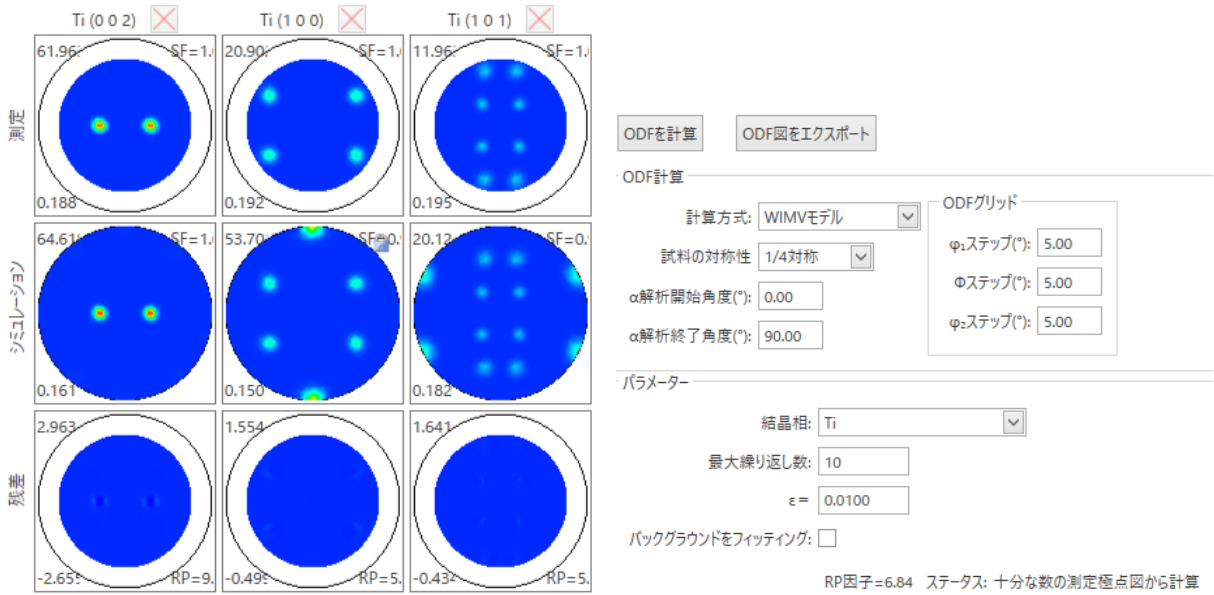


極点図をExportし、Triclinic→Orthorhombic→反射極点図作成

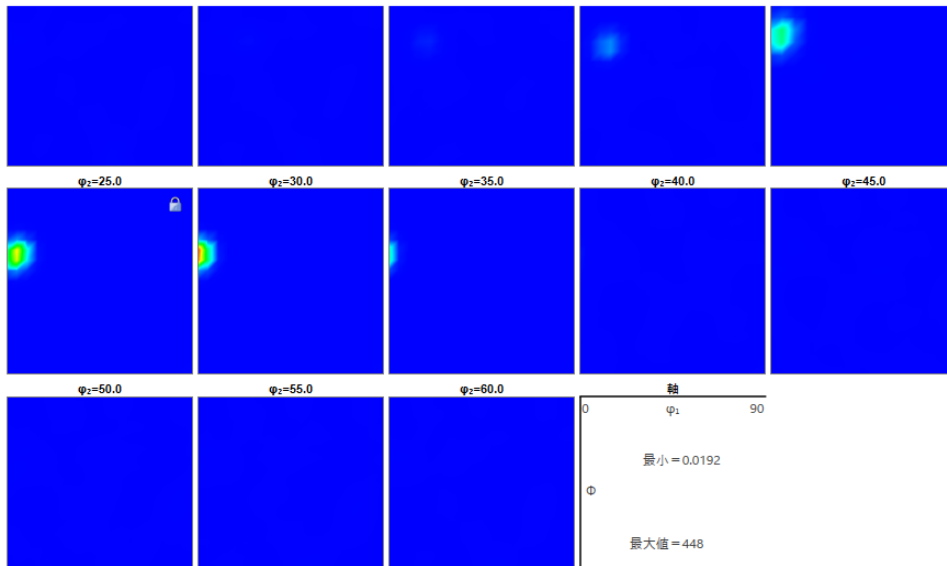


3. newODFで解析

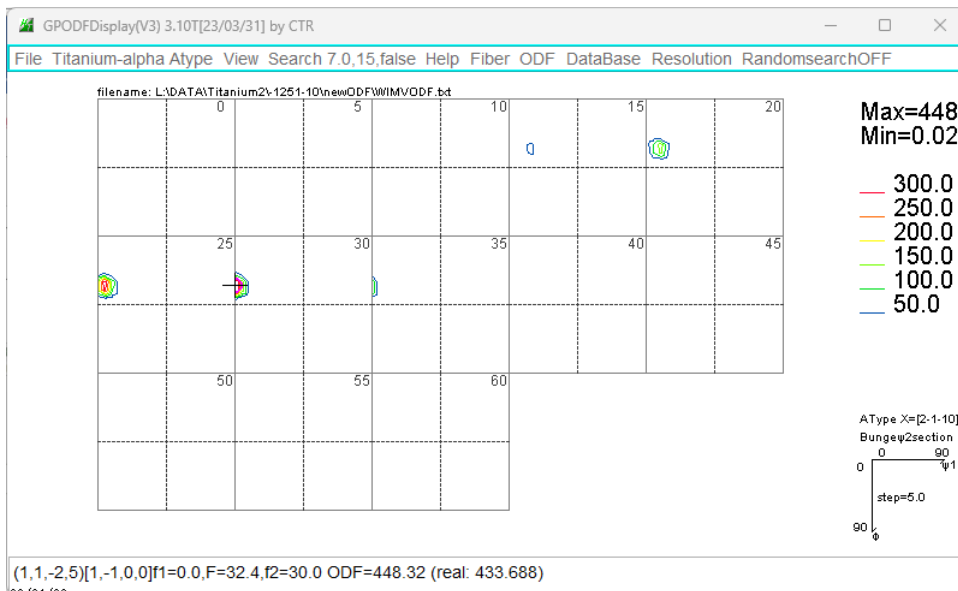
3.1 WIMVで解析



ODF結果



A-Typeで解析が行われている。



3. 2 A-Type 4 指数から 3 指数に変換

HexaConvert 1.11ST[23/03/31] by CTR

File Step Help

A X-Axis[100] ([2-1-10]) .. B X-Axis[210] ([10-10])

Miller Notation (3Axis Notation)

1 1 5 1 -1 0 hkl uvw

Miller Bravais Notation(4 Axis Notation)

1 1 -2 5 1 -1 0 0 hkil uvxw

Euler(p1Fp2)

0.0 32.424 30.0

Material select

Titanium-alpha.TXT

c/a 1.588 Input ψ 2 Angles 30.0 Calc

DISP

Position 10 Disp size 200 DISP

BG Corr Black Line size 1.0 MINUS

OK Return Structure

3. 3 データコンポーネントに (1 1 5) [1 -1 0] 追加

テクスチャコンポーネントを編集

タイプ: ピーク

結晶系: 六方晶

名称: 1151-10

方位: (1 1 5)[1 -1 0]

コンポーネントをDBに保存 キャンセル

3. 4 コンポーネントでVolume Fraction計算

ODFを計算

ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: コンポーネントモデル

試料の対称性: 1/4対称

α 解析開始角度(°): 0.00

α 解析終了角度(°): 90.00

ODFグリッド

φ_1 ステップ(°): 5.00

Φ ステップ(°): 5.00

φ_2 ステップ(°): 5.00

パラメーター

結晶相: Ti ODFをシミュレート

最小化アルゴリズム: 遺伝的アルゴリズム

母集団: 50 個体数: 100 ターゲット χ^2 : 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

RP因子=0.99 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算

コンポーネント定義


ランダム分率: 0.21 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 20.50

コンポーネント + -

コンポーネントをDBから読み込む

コンポーネントをDBに保存

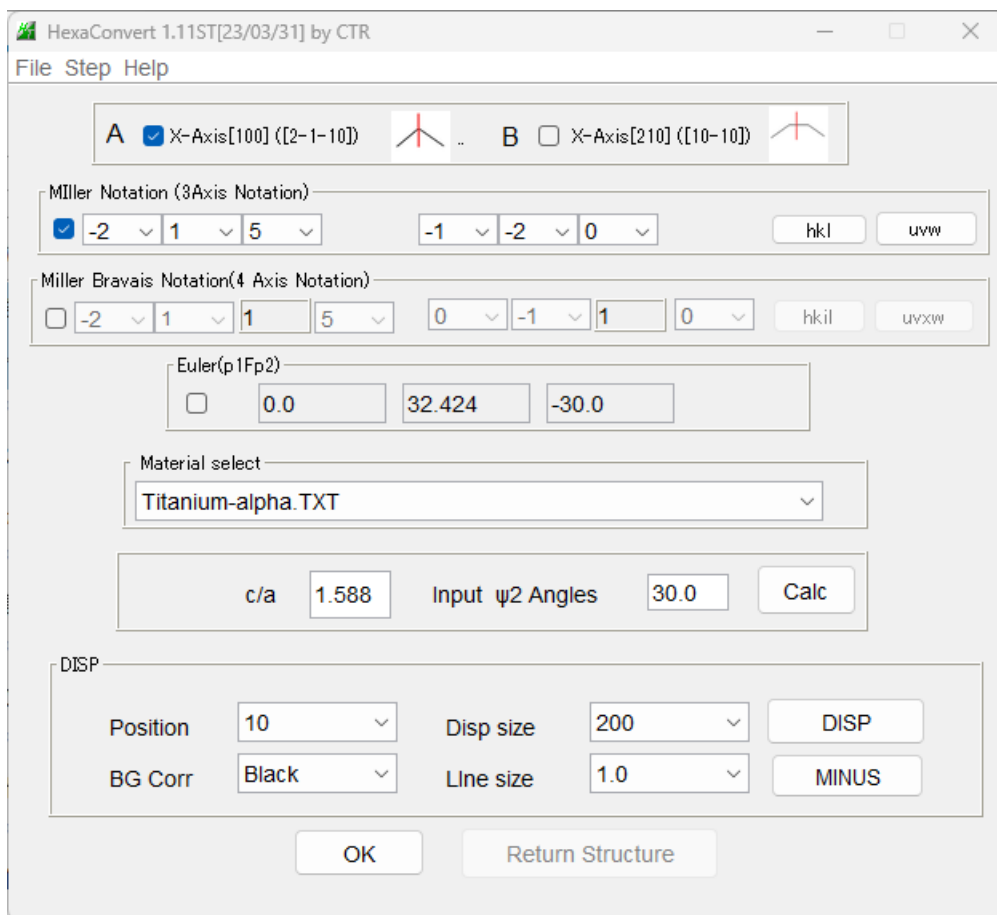
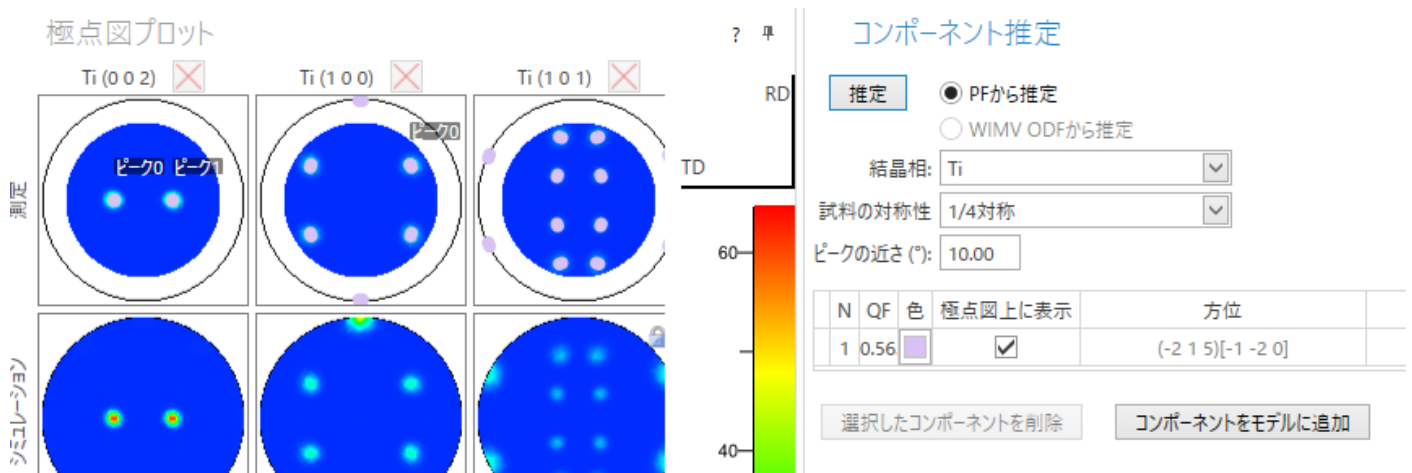
N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
▶ 1	ピーク	1151-10		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 1 5) [1 -1 0]	79.50

コンポーネントプロパティ

パラメーター	値	最小	最大	フィッティング
分率	0.80	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	9.99	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ_1 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	32.48	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ_2 (°)	30.00	0.00	60.00	<input type="checkbox"/>

MTEXで作成したB-Type $(-1\ 2\ 5)\ [2\ 1\ 0]$ 80%を
A-Type $\{1\ 1\ 5\} \langle 1\ -1\ 0 \rangle$ として79.5%で計算が行われた。

3. 5 コンポーネント推定モード検証

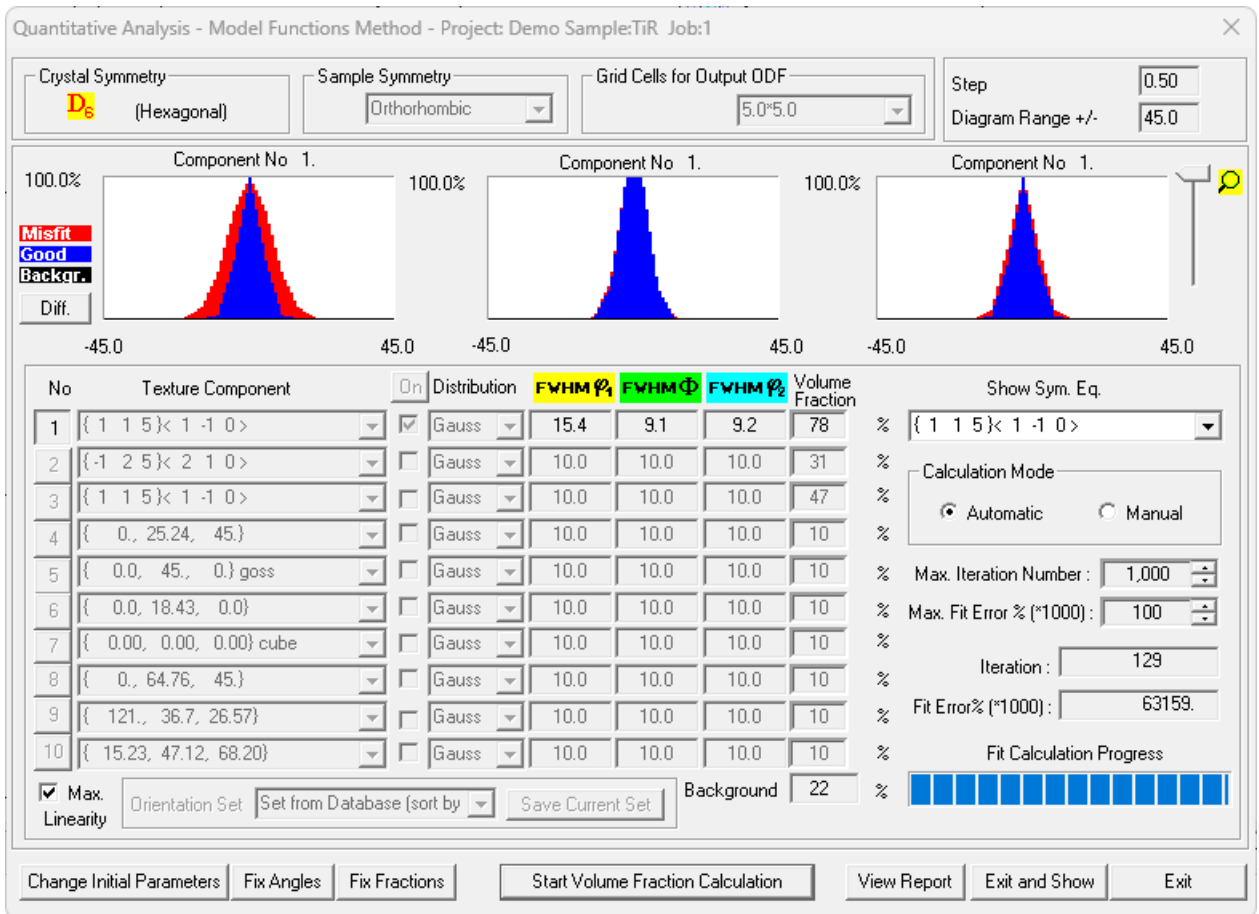


$\phi 2 = -30$ で検出されている。
コンポーネント追加で

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	ピーク		青	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 1 5)[1 -1 0]	84.25

$\phi 2 = 30$ に修正され、登録されている。

4, LaboTexで解析 (A-Typeで解析)



{ 1 1 5 } < 1 - 1 0 >をVF%=78%

LaboTexでは、A-Type <-> B-Type変換が可能

