

MTEXで作成極点図を用いて random 評価

2023年012月25日

*HelperTex Office*

## 概要

r a n d o mが含まれている極点図のODF解析結果から r a n d o m定量が行える事が知られている。  
では、r a n d o mが含まれる極点図から r a n d o mが推定できるか解析を行ってみます。

## 評価データ

MTEXにより、(c u b e + B r a s s + S + C o p p e r + G o s s) と r a n d o mと含有量を変化させ調べてみる。

```
CS= crystalSymmetry('cubic')
```

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

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

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

```
Ori2 = orientation.byMiller([1 1 0],[1 -1 2],CS)
```

```
Ori3 = orientation.byMiller([1 3 2],[6 -4 3],CS)
```

```
Ori4 = orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS)
```

```
Ori5= orientation.byMiller([1 1 0],[0 0 1],CS)
```

```
ODF=0.2* unimodalODF(Ori1,psi)+0.2* unimodalODF(Ori2,psi)+  
0.2* unimodalODF(Ori3,psi)+ 0.2* unimodalODF(Ori4,psi)+  
0.2* unimodalODF(Ori5,psi)
```

```
r a n d o m O D F
```

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

ODF と randomODF の比率を変えた ODF を作成し極点図を E x p o r t する。

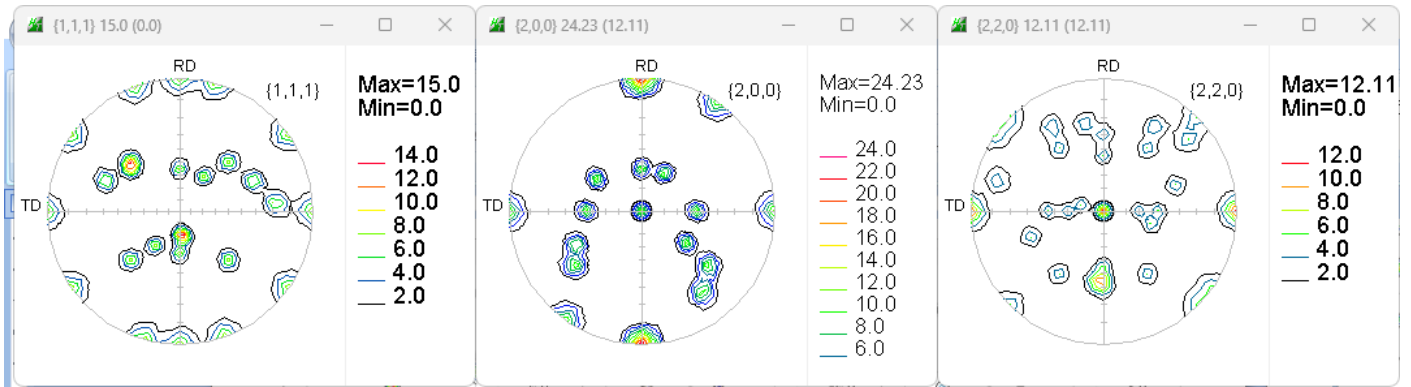
```
h = {Miller(1,1,1,CS),Miller(2,0,0,CS),Miller(2,2,0,CS)}
```

```
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

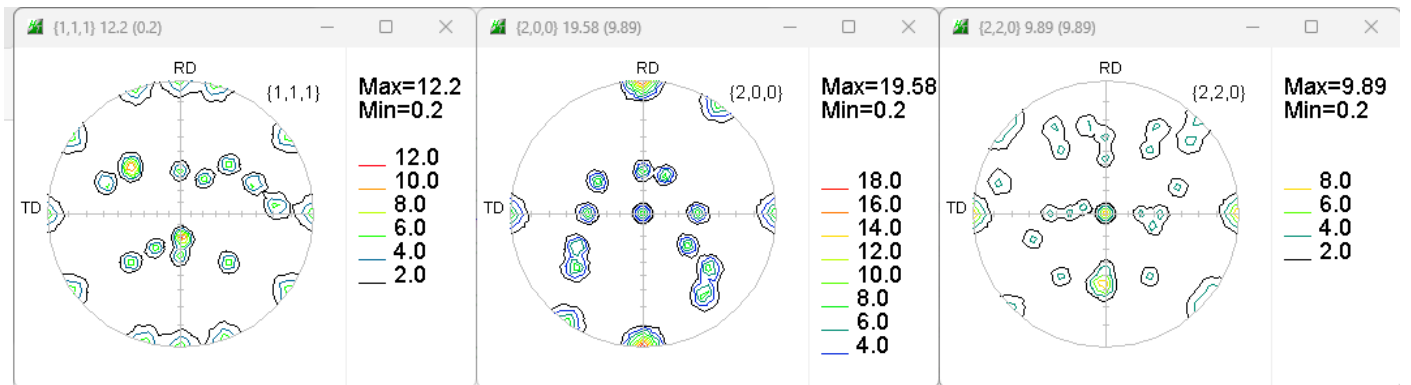
実際のサンプルで r a n d o m評価を行う場合、正確なバックグラウンド除去が必要になります。

MT EXで計算された完全極点図

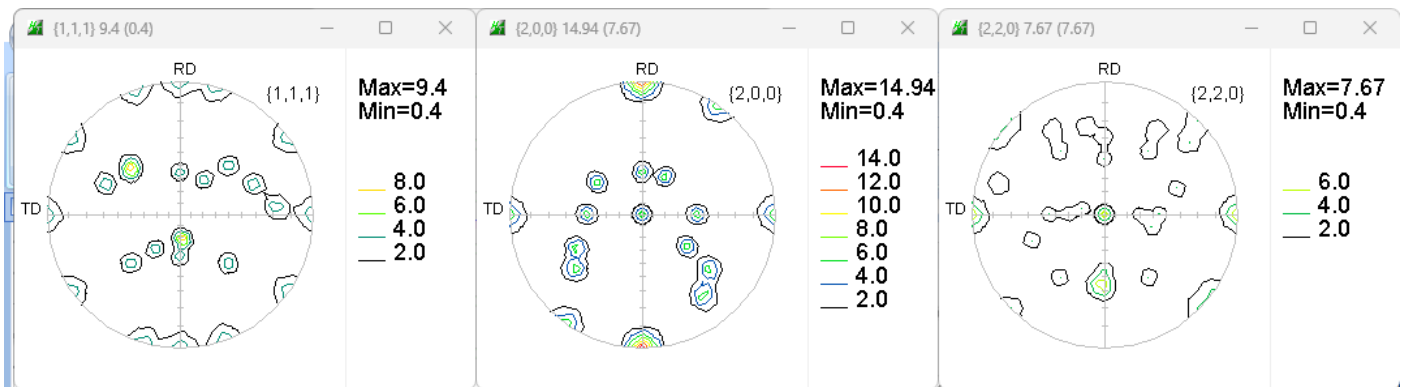
Random0%



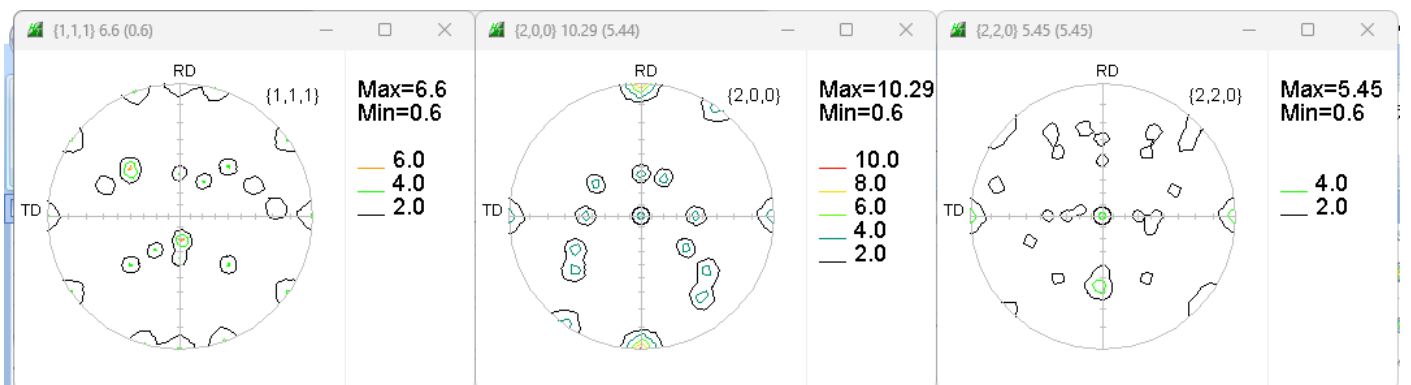
Random20%



Random40%

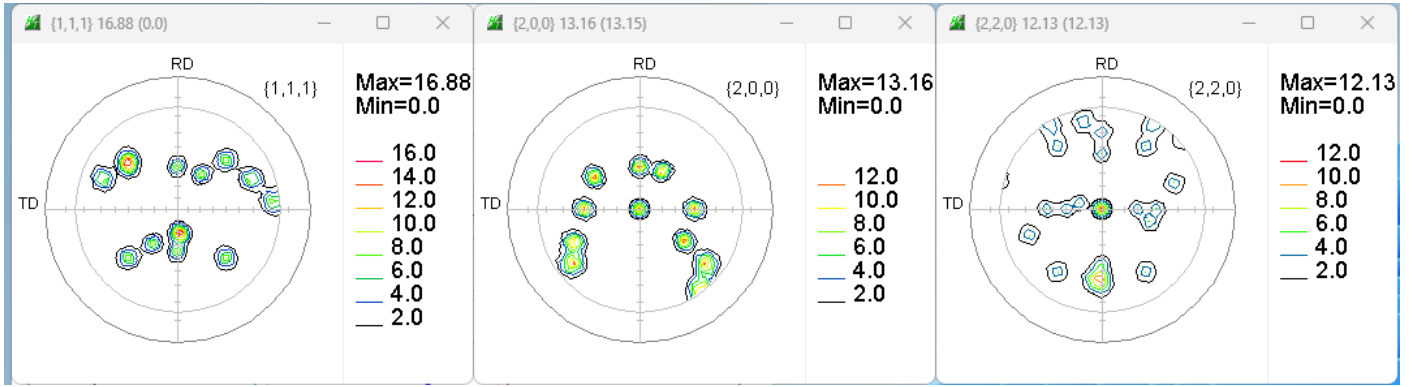


Random60%

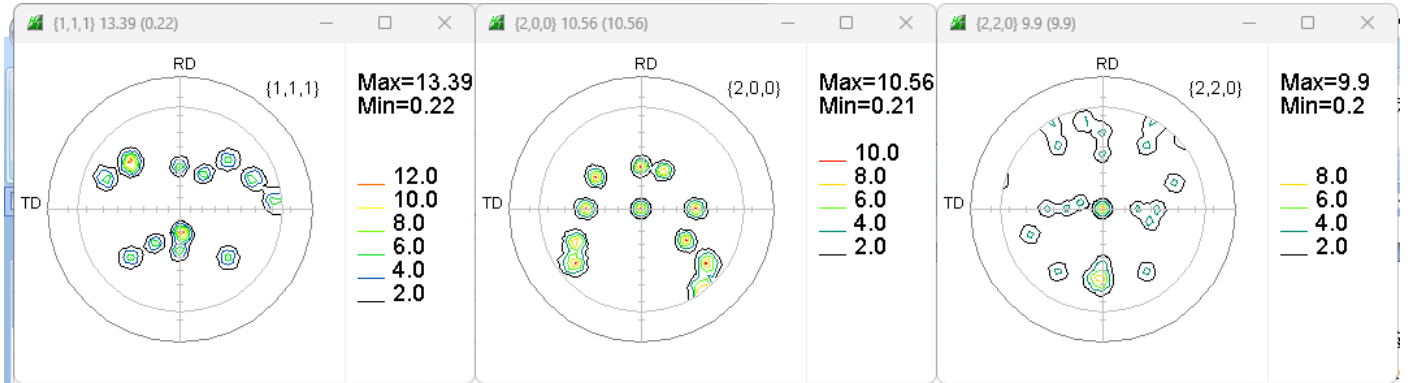


# 規格化不完全極点図 (1 5 → 9 0)

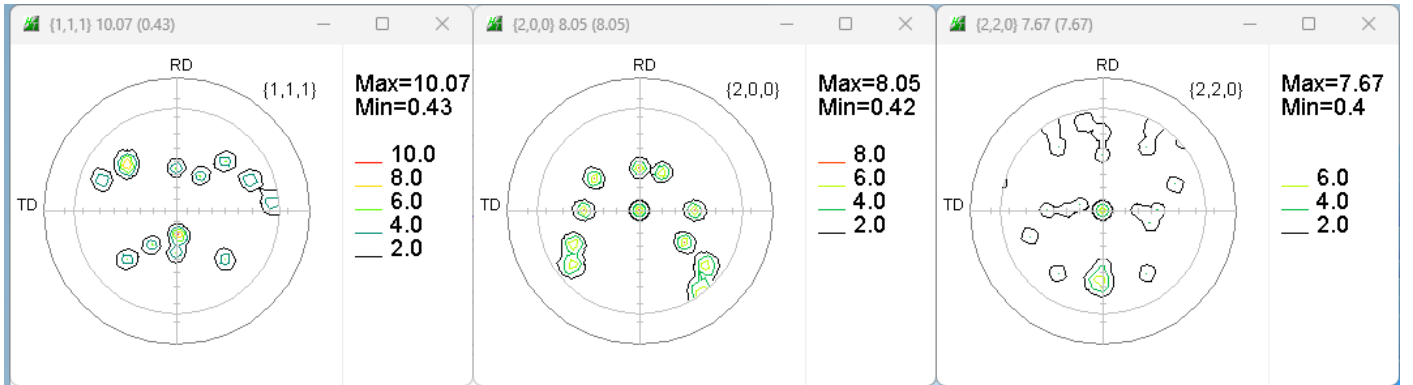
## Random0%



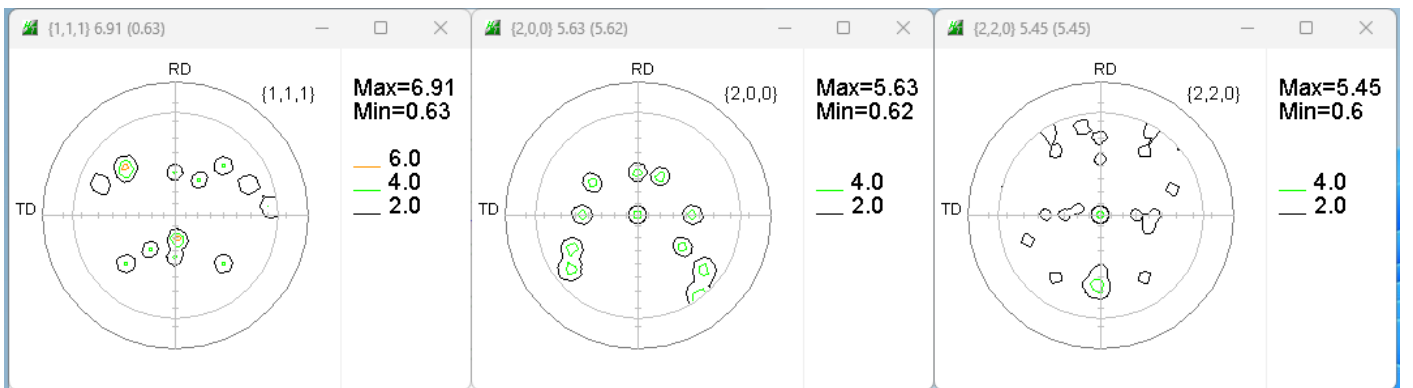
## Random20%



## Random40%



## Random60%

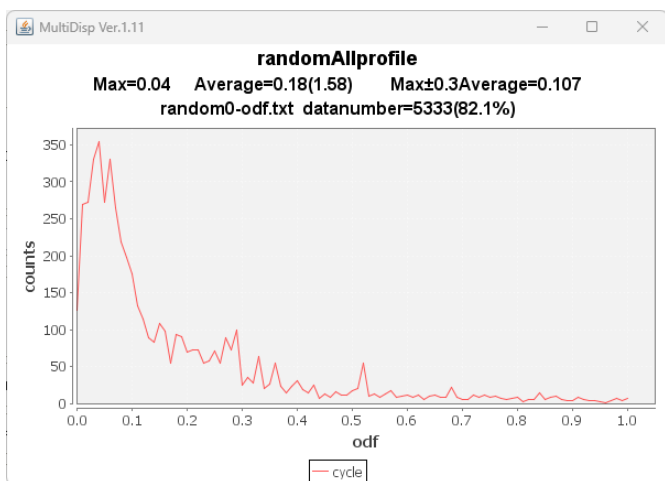
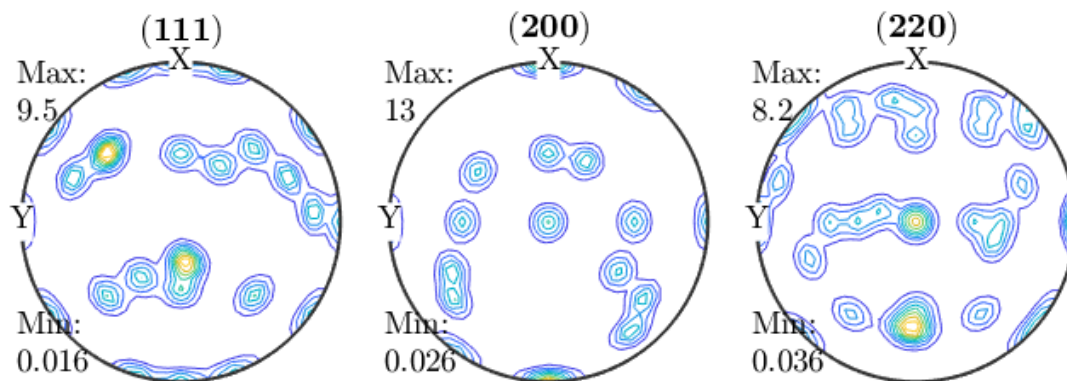


規格化により最小値 (randomレベル) が増えている。ODF解析が必要です。

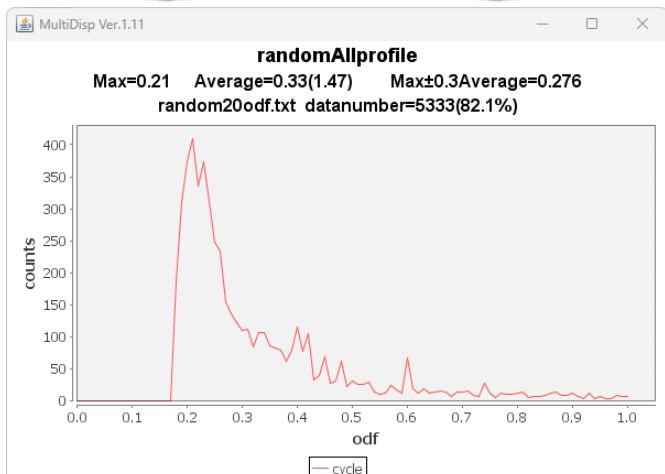
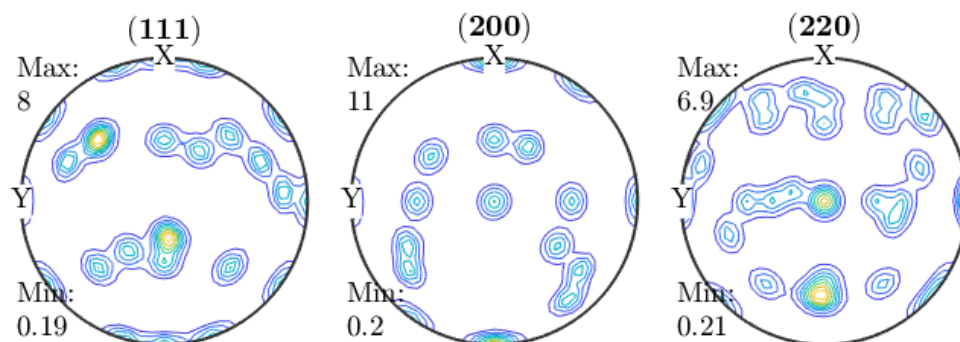
このデータを各種ODFで解析を行う。

MT EXによる解析

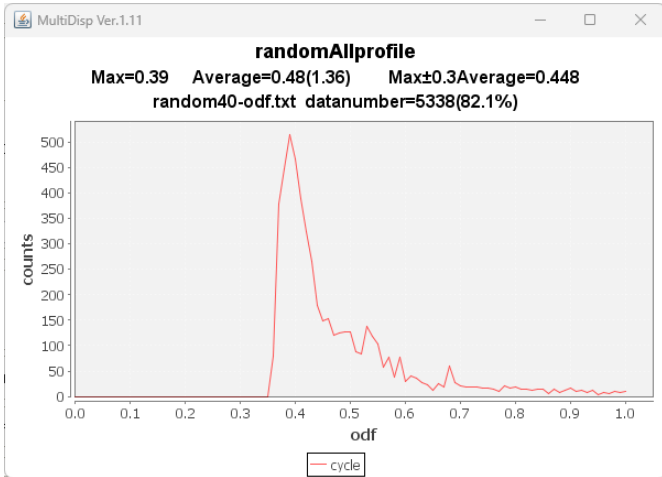
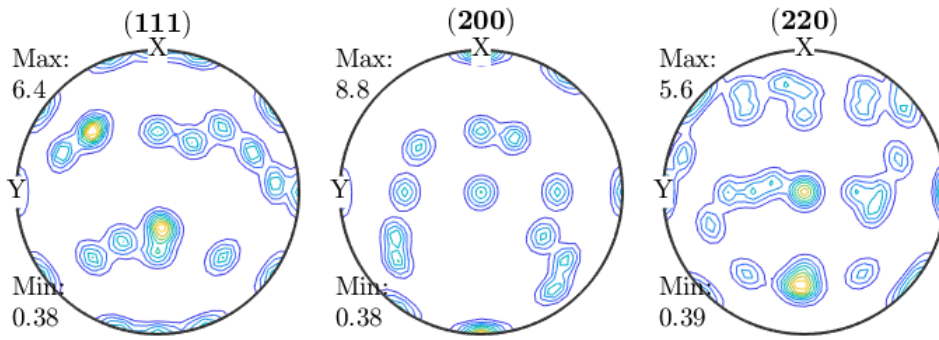
Random0%



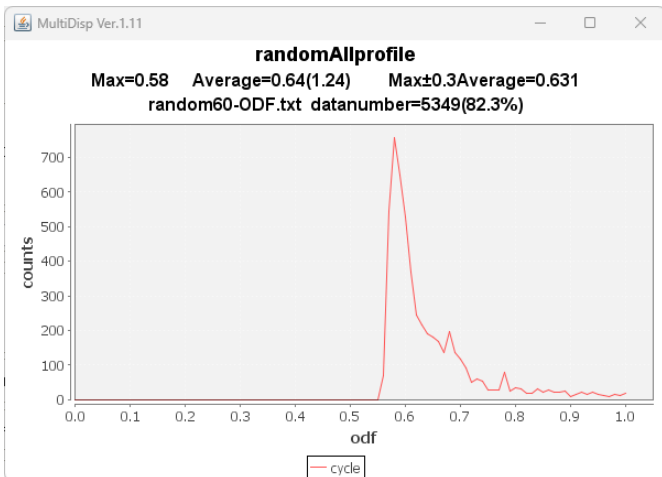
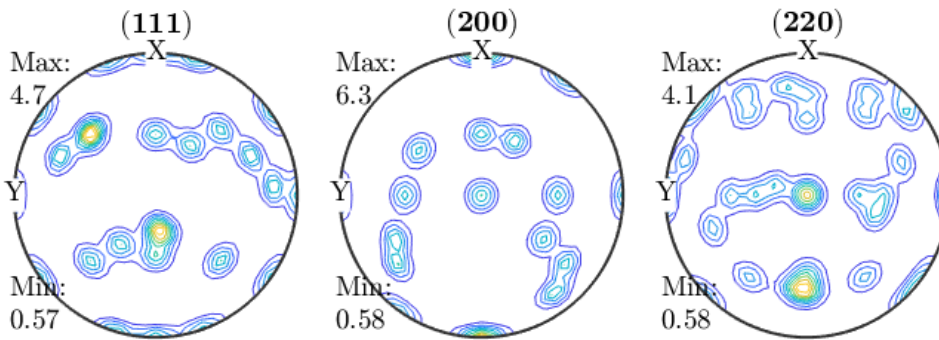
Random20%



Random40%



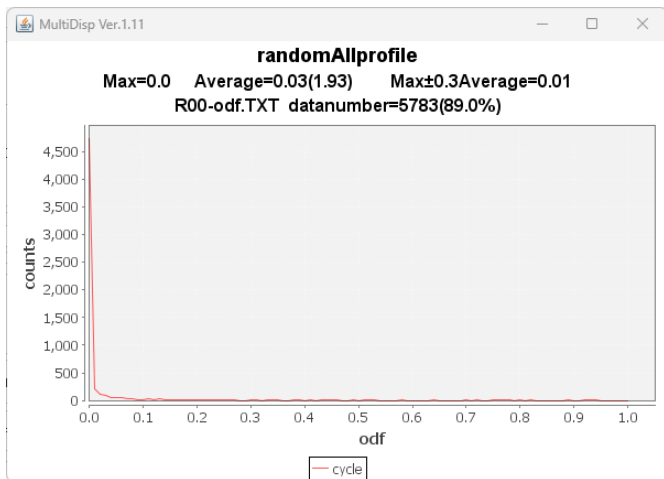
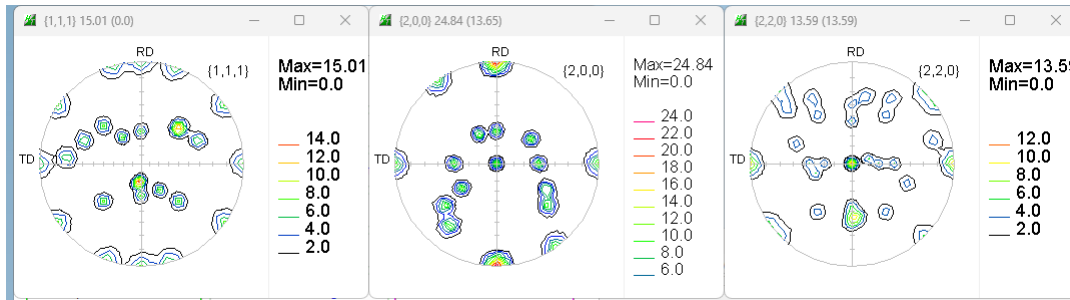
Random60%



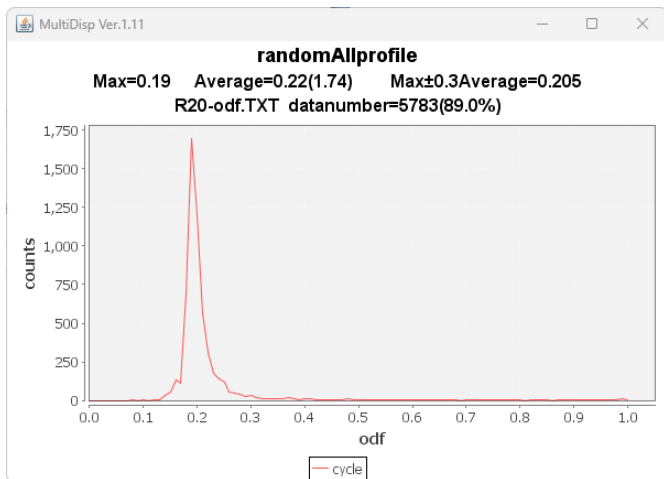
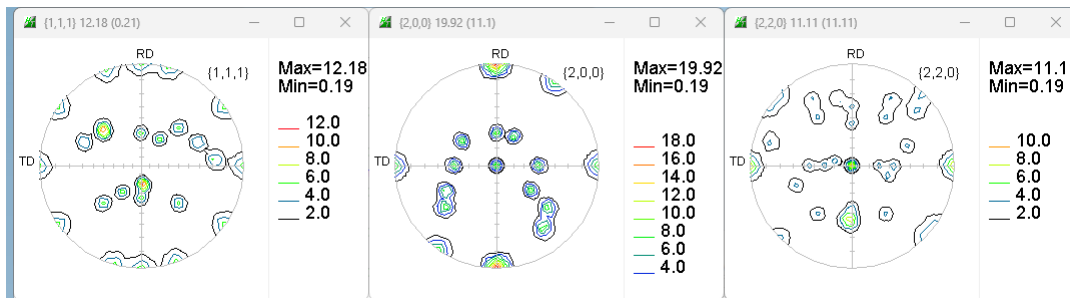
# LaboTex

LaboTexでは複数の極点図を表示すると個々の最小値が分からないため  
Exportし、GPPoleDisplayで表示

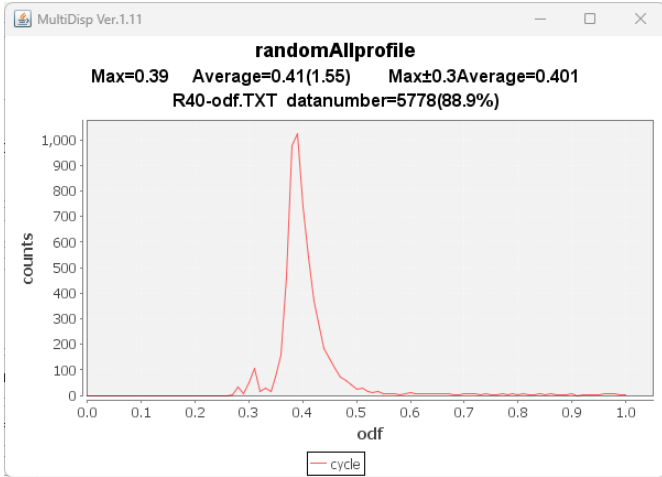
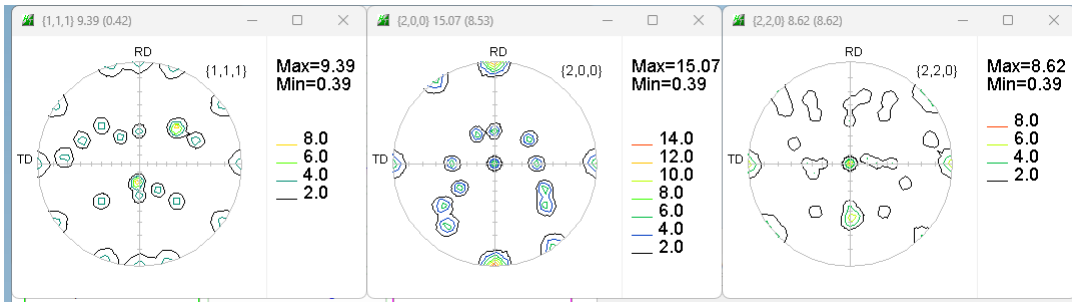
## Random0%



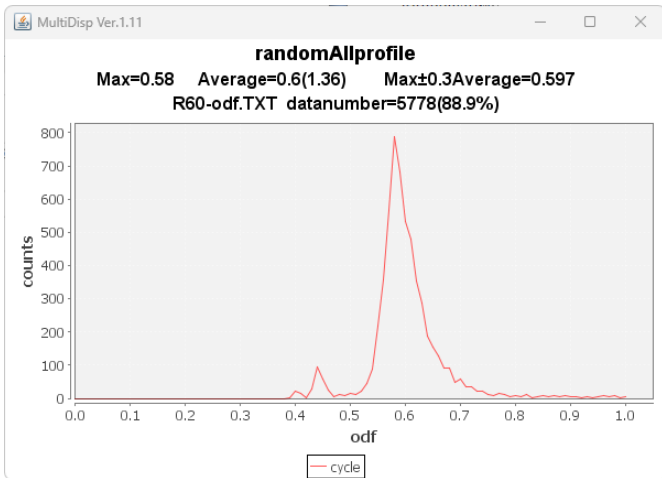
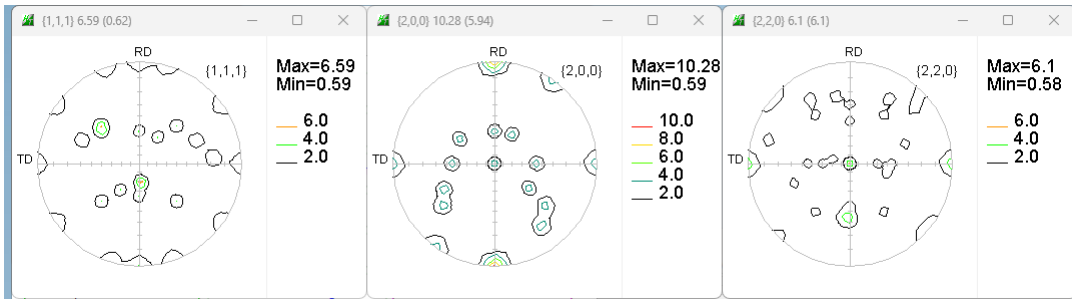
## Random20%



## Random40%



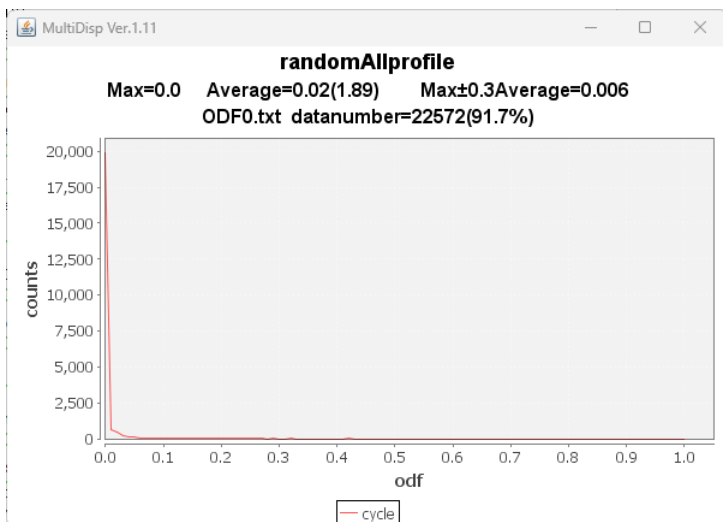
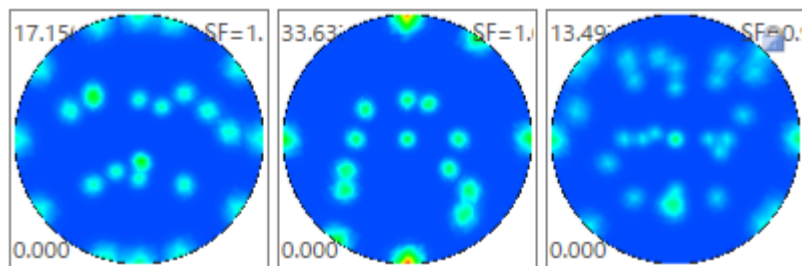
## Random60%



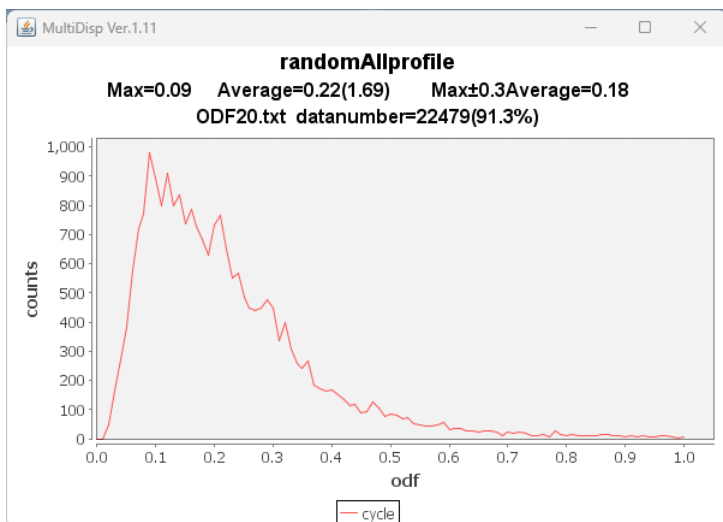
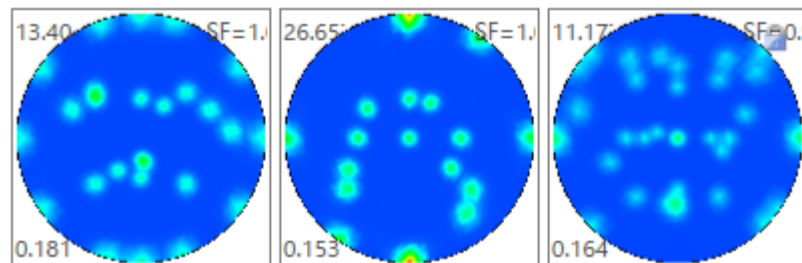


NewODF

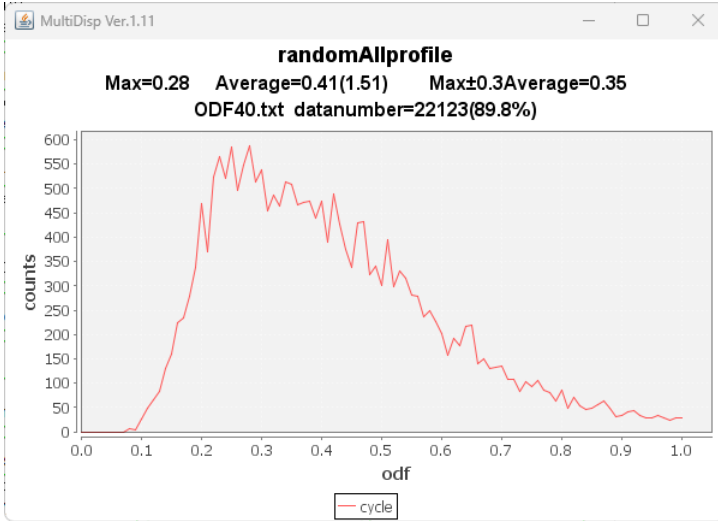
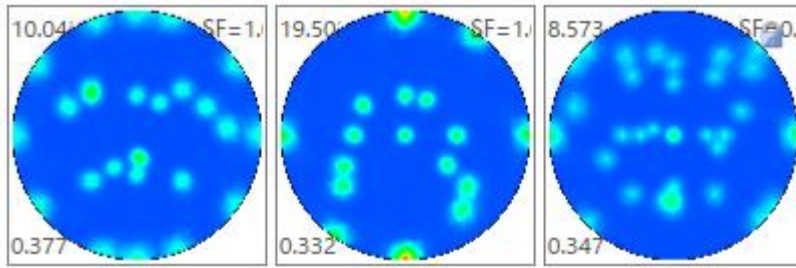
Random0%



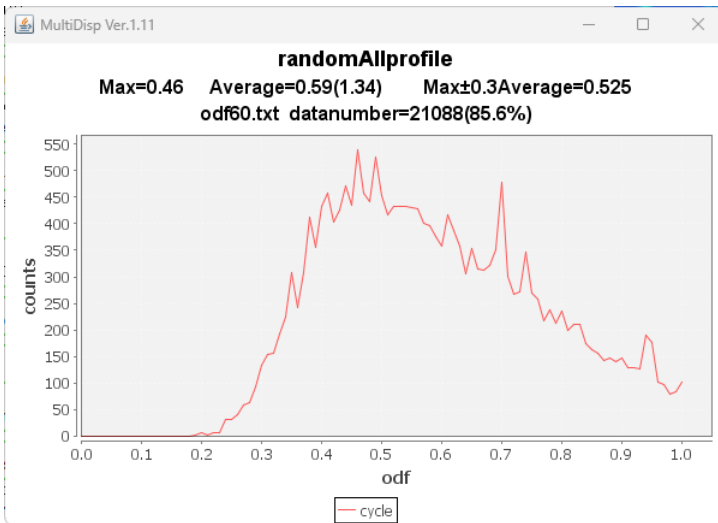
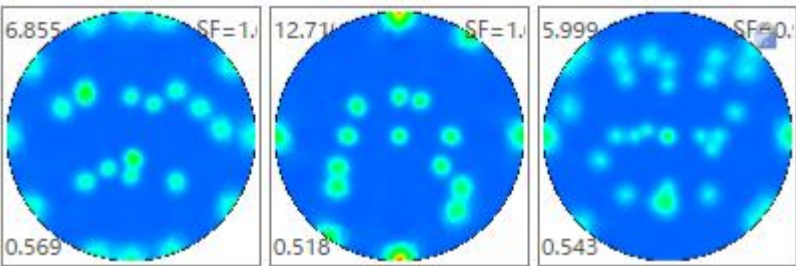
Random20%



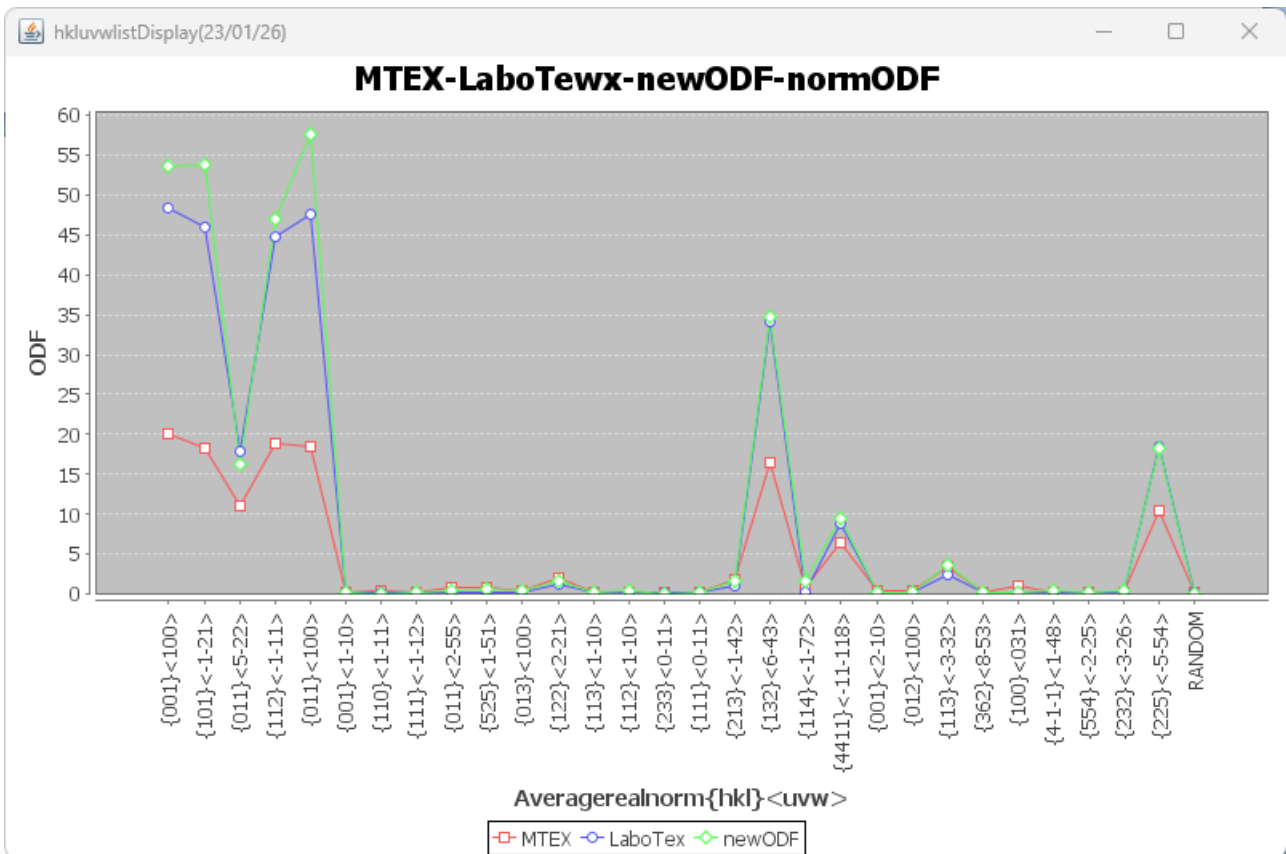
### Random40%



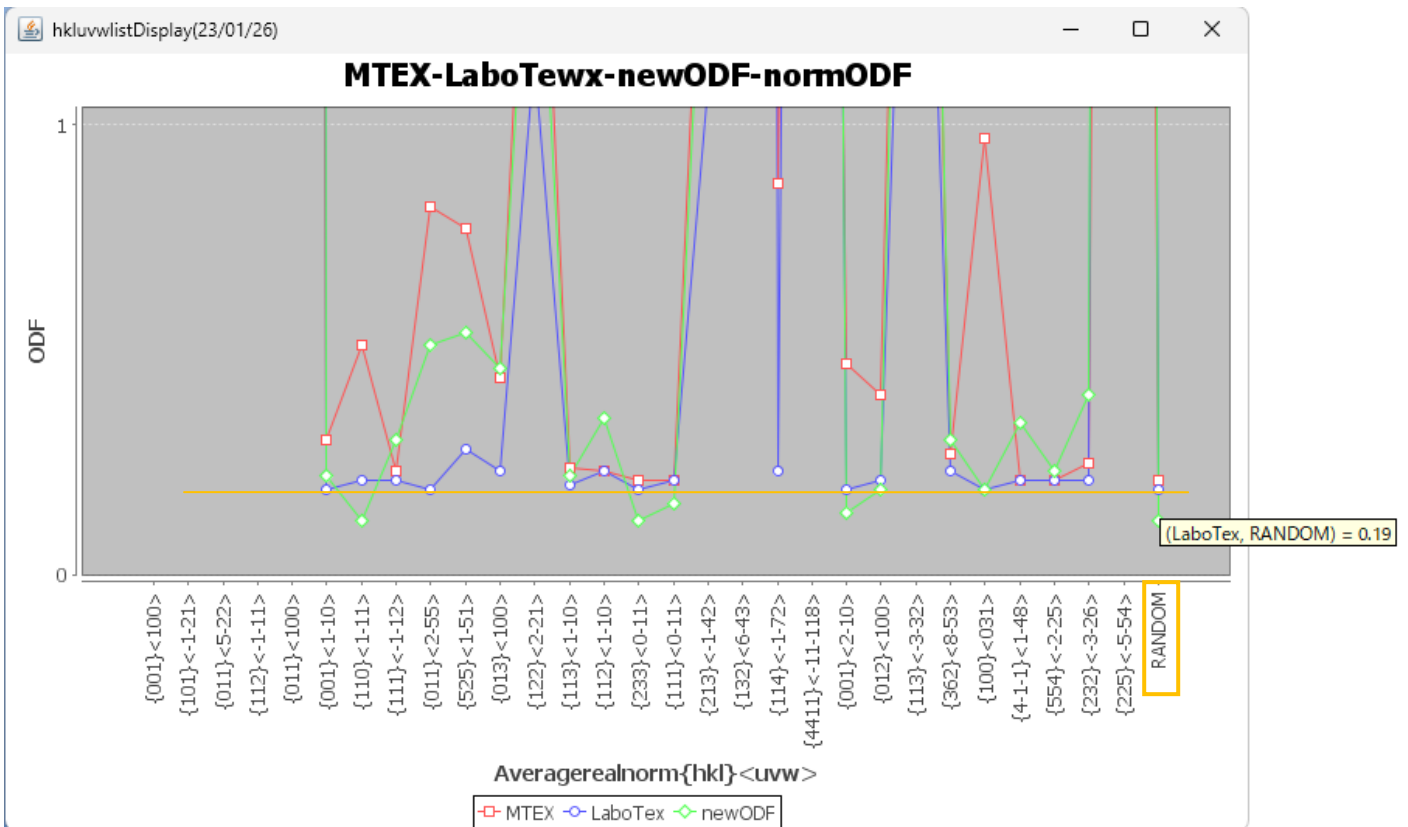
### Random60%



ODF方位密度と r a n d o m



本比較を行うため (newODFデータはTriclinic→Orthorhombic変換サポートなし)  
MTEX, LaboTexはODF解析をTriclinicで解析、Orthorhombic変換  
newODFは、ODF解析をOrthorhombicで行った



normODFは、ODF方位密度 1 : 2 : 4 の比率を 2 : 2 : 2 に補正

## まとめ

### 規格化不完全極点図

random	不完全極点図最小値		
	{111}	{220}	{200}
0%	0.00	0.00	0.00
20%	0.22	0.21	0.20
40%	0.43	0.42	0.40
60%	0.63	0.62	0.60

今回、5本の方位で極点図を作成しているため、規格化しても、最小値のブレは少ない。

### 不完全極点図から ODF 解析を行った再計算極点図の最小値と GPODFDisplay で計算を行った random 値

random	MTEX				LaboTex				NewODF			
	{111}	{220}	{200}	ODF	{111}	{220}	{200}	ODF	{111}	{220}	{200}	ODF
0%	0.016	0.026	0.036	0.040	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
20%	0.190	0.200	0.210	0.210	0.190	0.190	0.190	0.190	0.181	0.153	0.164	0.090
40%	0.380	0.380	0.390	0.390	0.390	0.390	0.390	0.390	0.377	0.332	0.347	0.280
60%	0.570	0.580	0.580	0.580	0.590	0.590	0.580	0.580	0.569	0.518	0.543	0.460

極点図の最小値、ODF 解析の randomLevel から random 定量が行える。

MTEX でシュミレーションを行った極点図では、MTEX, LaboTex は正確な計算が行われている。

極点図の最小値と GPODFDisplay で計算する random レベルと一致しています。

又、不完全極点図の最小値が random% とほぼ一致している。

NewODF は MTEX で作成した極点図では相性が悪く、ゴーストが多くなるため random 解析に適していない。

