

GPODFDisplay(Ver3.01)による

ODF図から任意の方位密度を求める

2022年06月14日

HelperTex Office

概要

計算された ODF 図から指定した e u l e r 角度、あるいは $\{h k l\} \langle v u v w \rangle$ の方位密度を求める場合があります。

しかし E x p o r t した ODF ファイルでは間隔が 5 度で隙間があり、正確な方位密度は計算できません
通常、 $(\phi 2, \Phi, \phi 1, \text{密度})$ から e u l e r 角度の近い値を参照しています。

正確に求めるに E x p o r t した ODF に戻らなければ得られません。

しかし、ODF ソフトウェアによっては、任意の方位計算がサポートされていない場合があります。

以下に、L a b o T e x で R 方位を作成し、調べてみます。

G O P D F D i s p l a y では ODF 図を補間して計算しています。

R 方位

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ_1	FWHM Φ	FWHM ϕ_2	Volume Fraction
1	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	50 %
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 %

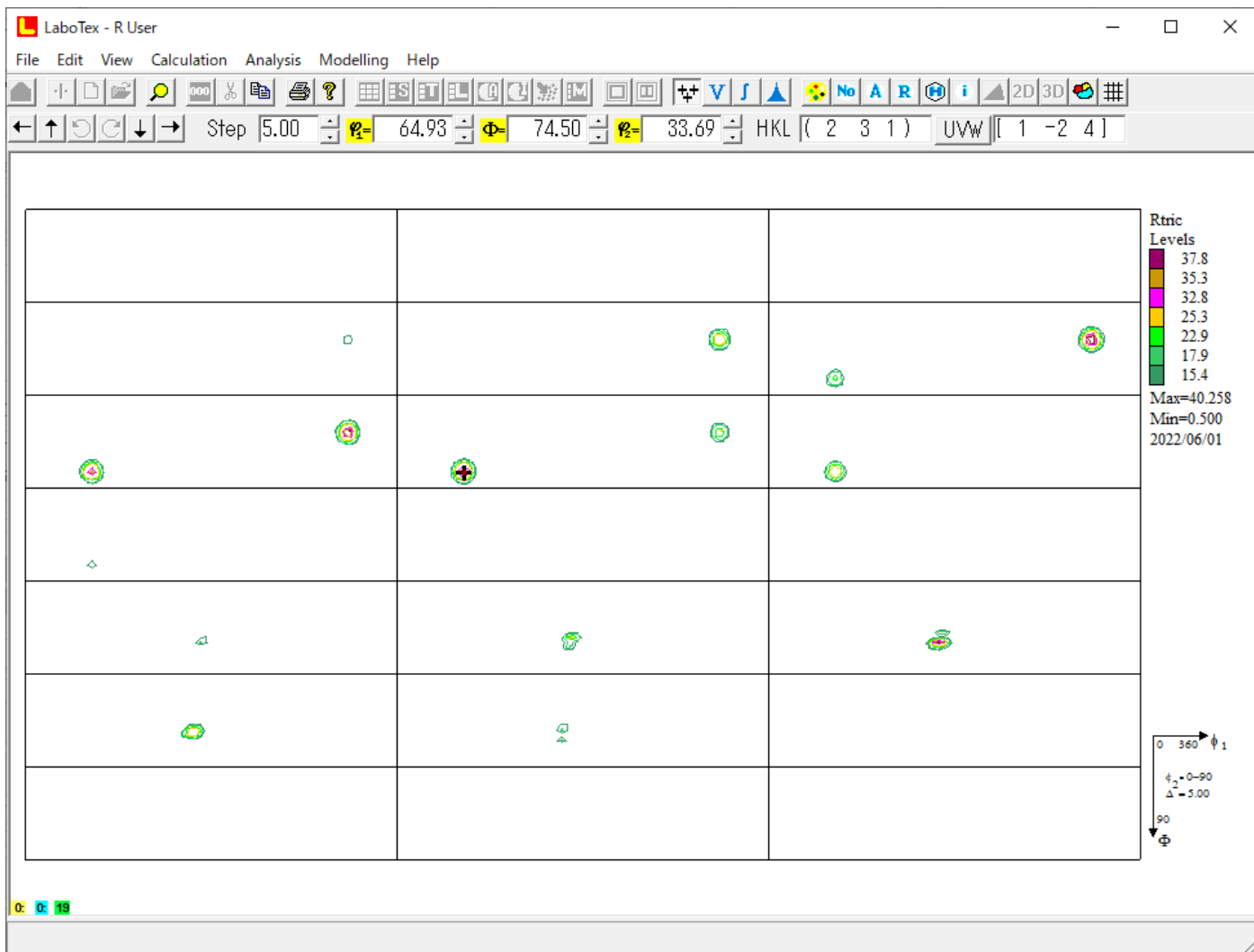
Miller Indices
(hkl)[uvw] 2 3 1 1 -2 4 Calc

Euler Angle
(p1 P p2) <=90 64.9342 74.4986 33.6901 Calc

Present Condition
Euler Angle
64.9342 74.4986 33.6901
Double Miller Indices
0.5345 0.8018 0.2673 0.2182 -0.4364 0.8729

DISP
Position 10 Disp size 400 DISP
BG color Black Line size 2.0 Minus

計算されODF図 (Max : 40.258)



マウス右クリックで、近傍の方位が計算される。

ODF	(HKL)[Uvw]	$\phi_1\phi_2$	Misorientation
38.887	{ 2 3 1}[1 -2 4]	64.9 74.5 33.7	3.87
36.354	{ 10 14 5}[2 -5 10]	66.5 73.8 35.5	2.62
34.469	{ 5 7 2}[2 -4 9]	66.8 76.9 35.5	5.73
34.427	{ 5 8 3}[3 -6 11]	63.6 72.4 32.0	4.69
34.378	{ 2 3 1}[2 -5 11]	68.8 74.5 33.7	4.08
33.975	{ 6 10 3}[2 -3 6]	62.3 75.6 31.0	7.75
33.889	{ 9 13 5}[1 -3 6]	68.1 72.5 34.7	2.15
33.860	{ 5 8 2}[2 -3 7]	65.3 78.0 32.0	7.56
33.835	{ 5 7 2}[3 -5 10]	62.5 76.9 35.5	6.74
33.230	{ 3 5 2}[3 -7 13]	65.8 71.1 31.0	4.20

Only with the same ODF section Max. Value of Miller Indices = 15

本来、{231}[1-24]が最大値になるはずですが、最大値より小さい値が計算されている。これは、R方位を5度間隔のODF図が作成され、このODFからeuler角度位置密度が計算されている。

ExportしたODF

5度間隔のODF格子点密度

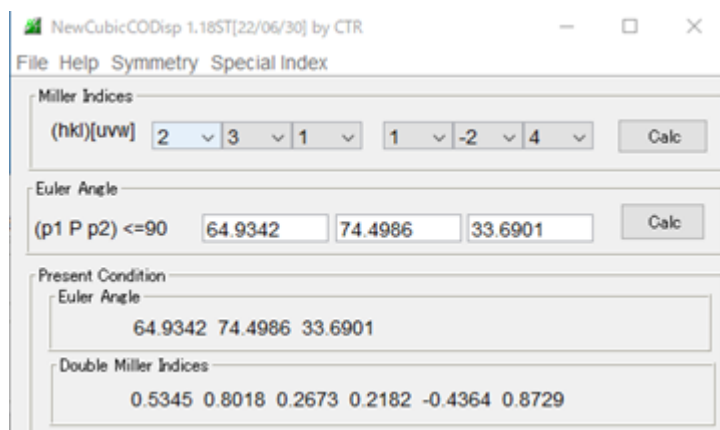
PHI1	PHI	PHI2	ODF↓
0.0	0.0	0.0	0.5↓
0.0	0.0	5.0	0.5↓
0.0	0.0	10.0	0.5↓
0.0	0.0	15.0	0.5↓
0.0	0.0	0.0	0.519105↓
65.0	75.0	0.0	0.519105↓
65.0	75.0	5.0	0.656709↓
65.0	75.0	10.0	1.4165↓
65.0	75.0	15.0	4.32334↓
65.0	75.0	20.0	11.8815↓
65.0	75.0	25.0	24.6852↓
65.0	75.0	30.0	37.1947↓
65.0	75.0	35.0	40.2576↓
65.0	75.0	40.0	31.2619↓
65.0	75.0	45.0	17.4959↓
65.0	75.0	50.0	7.20386↓
65.0	75.0	55.0	2.38724↓
65.0	75.0	60.0	0.879047↓
65.0	75.0	65.0	0.55429↓
65.0	75.0	70.0	0.50554↓
65.0	75.0	75.0	0.500404↓
65.0	75.0	80.0	0.500104↓
65.0	75.0	85.0	0.501657↓
65.0	75.0	90.0	0.519105↓

最大値は (65, 75, 35) で40.258を得る。

GPODFDisplayの方位密度計算方法



R方位の場合



Version1では、

(65, 75, 35) の方位密度を計算する

Version2では

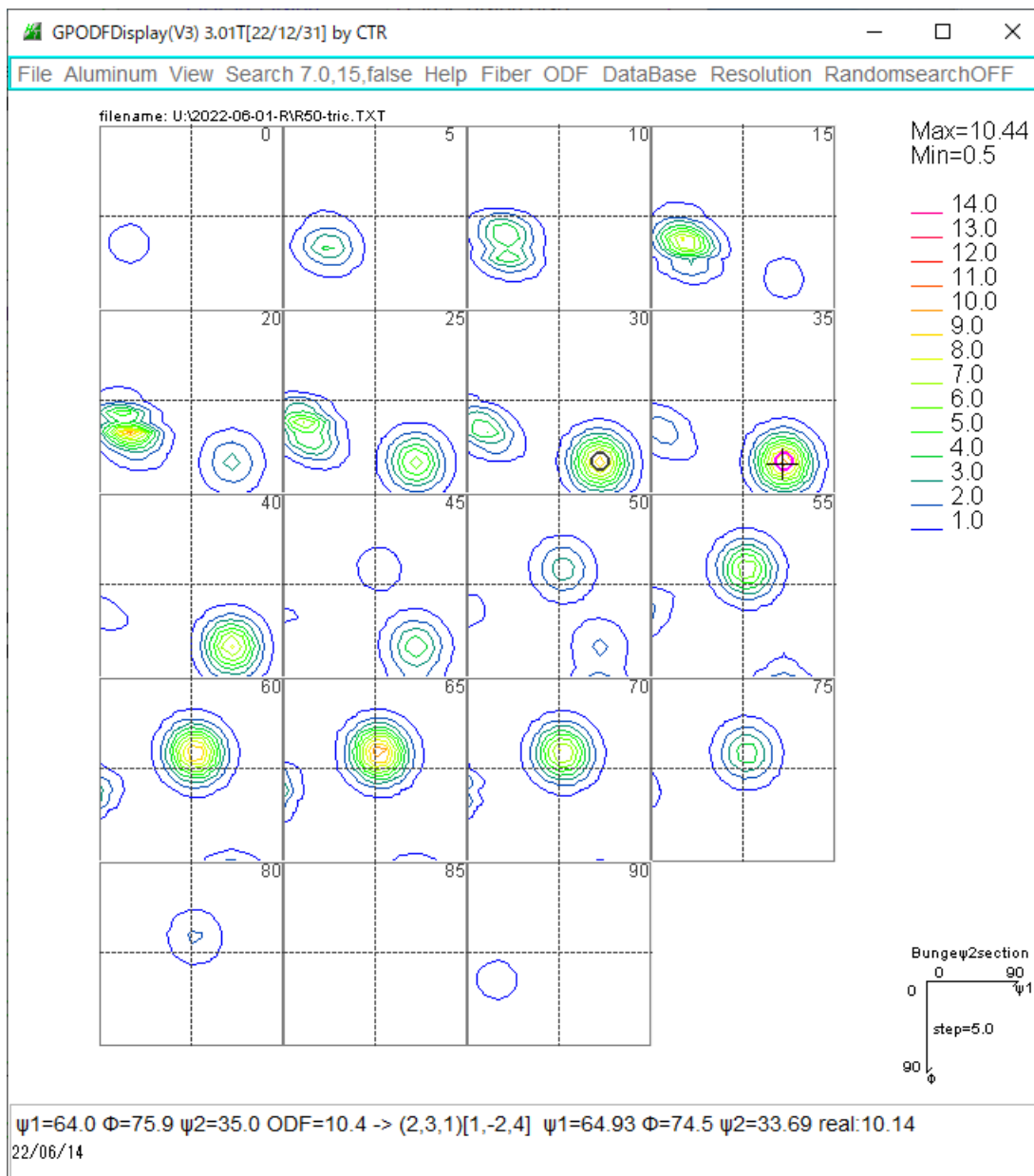
(65, 75, 34) をデータ補間により計算

Version3では

(64.9342, 74.4986, 33.6901) をデータ補間により計算

GPODFDisplayによる方位計算

マウスカーソル移動によるリアルタイム表示

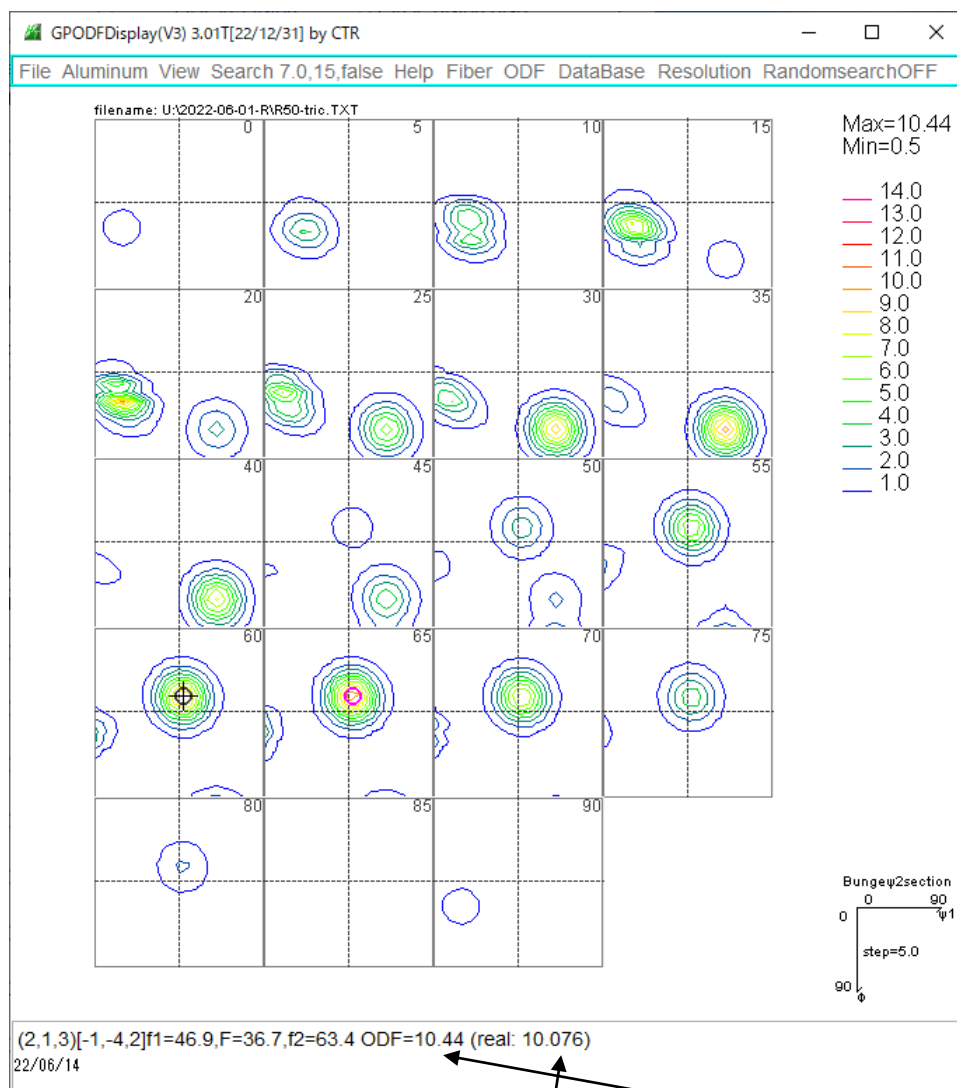
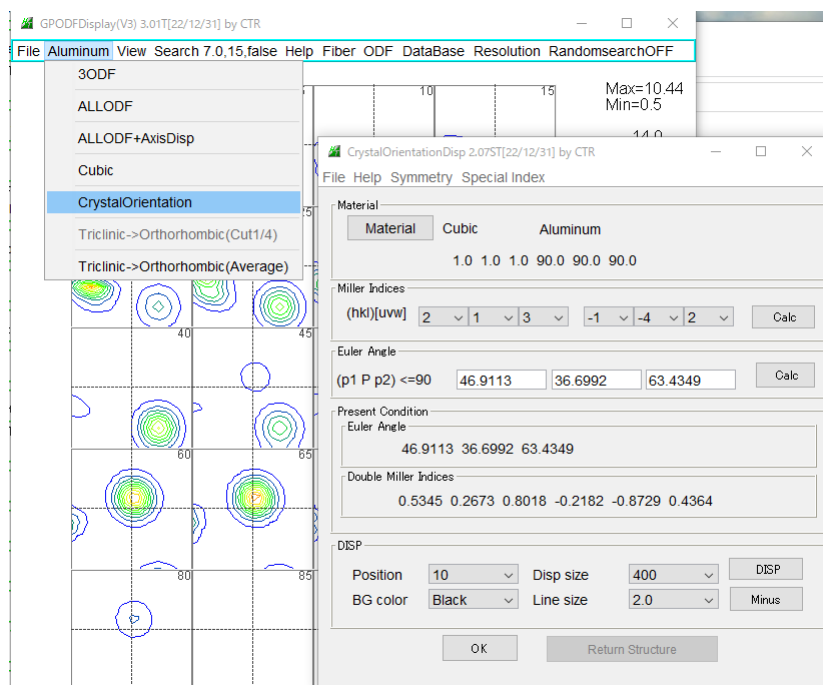


マウスをクリックで表示が固定される

クリック位置 ; : 十字 (+) 位置

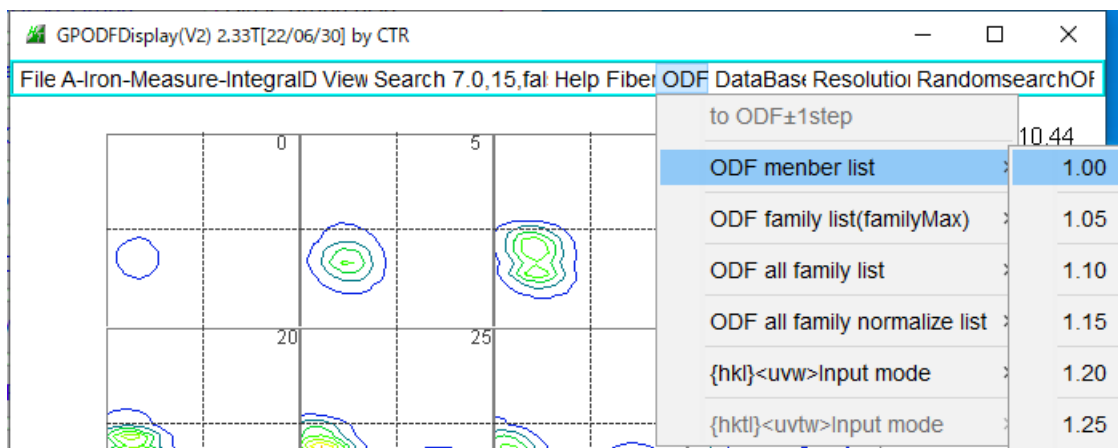
ϕ 2 断面に赤丸と黒丸が表示されている。 ϕ 2 = 33.68 のため、
 ϕ 断面 30 度と断面 35 度の間を表示している。

方位の直接入力



計算されたeuler角度(64.9,74.5,33.7)から5度間隔のODF格子点の密度とeuler角度実数から補間した方位密度を表示 (Version 3)

データベースに登録されている方位密度を求める



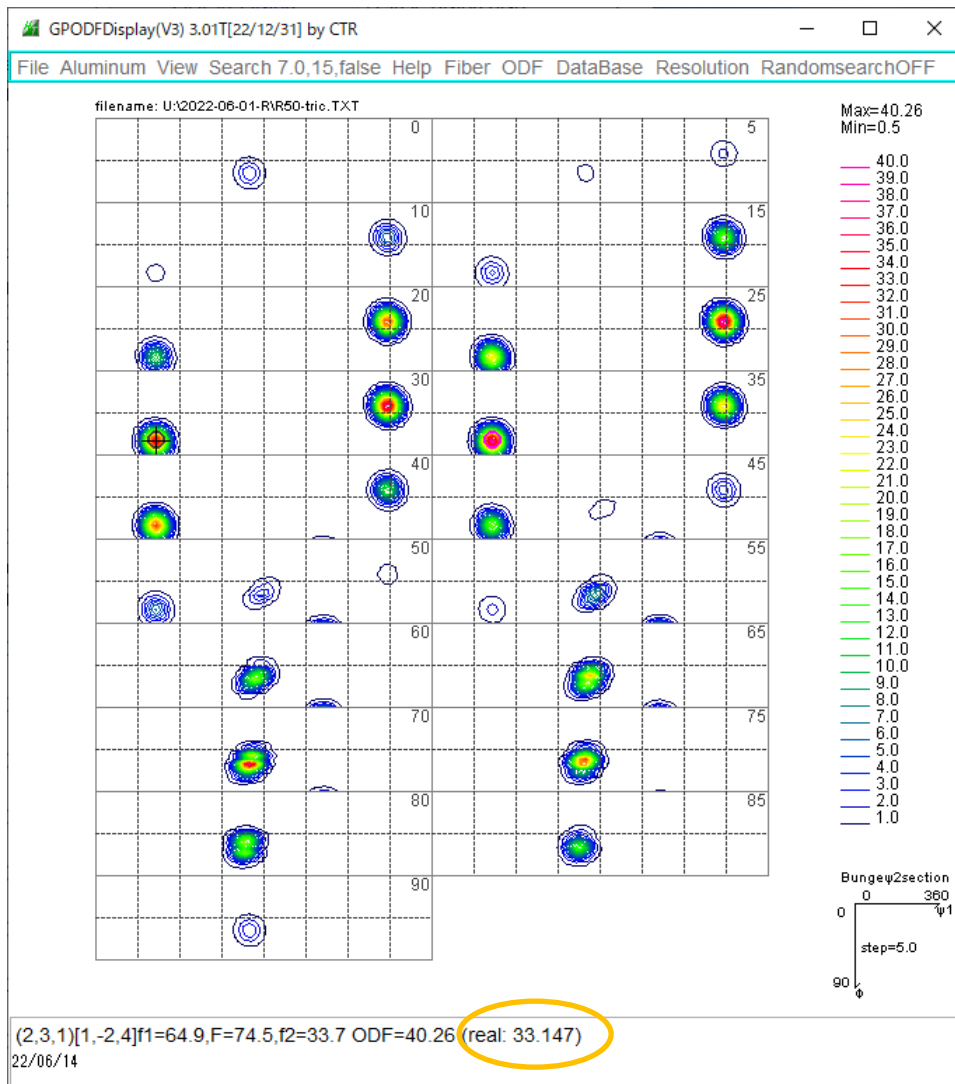
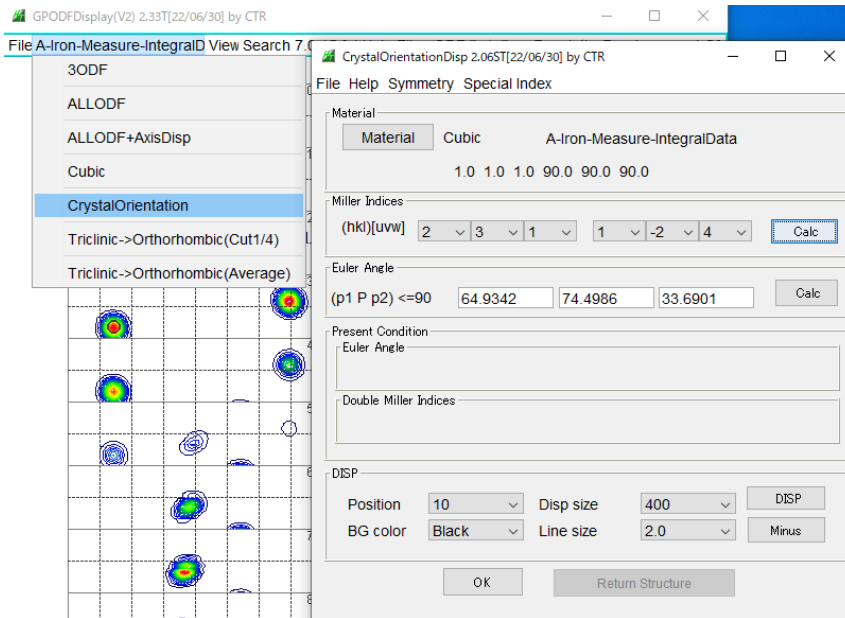
TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\ODFDisplay\ODF.txt

File Help

Orientation	φ_1	Φ	φ_2	ODF(real)
(2 1 3)[-1 -4 2]	46.91	36.7	63.43	10.08
(2 3 1)[1 -2 4]	64.93	74.5	33.69	8.66
(2 1 3)[-3 -6 4]	58.98	36.7	63.43	6.82
(1 3 2)[4 -2 1]	14.96	57.69	18.43	6.44
(1 3 2)[6 -4 3]	27.03	57.69	18.43	4.3
(2 3 1)[3 -4 6]	52.87	74.5	33.69	2.64
(1 1 0)[-2 2 -5]	60.5	90.0	45.0	1.93
(2 1 2)[-1 -2 2]	63.43	48.19	63.43	1.85
(3 6 2)[8 -5 3]	18.43	73.4	26.57	1.74
(2 6 3)[3 -5 8]	63.43	64.62	18.43	1.5
MAXODF=10.44	MINIODF=0.5 (Weight=0 Cycle=1)			

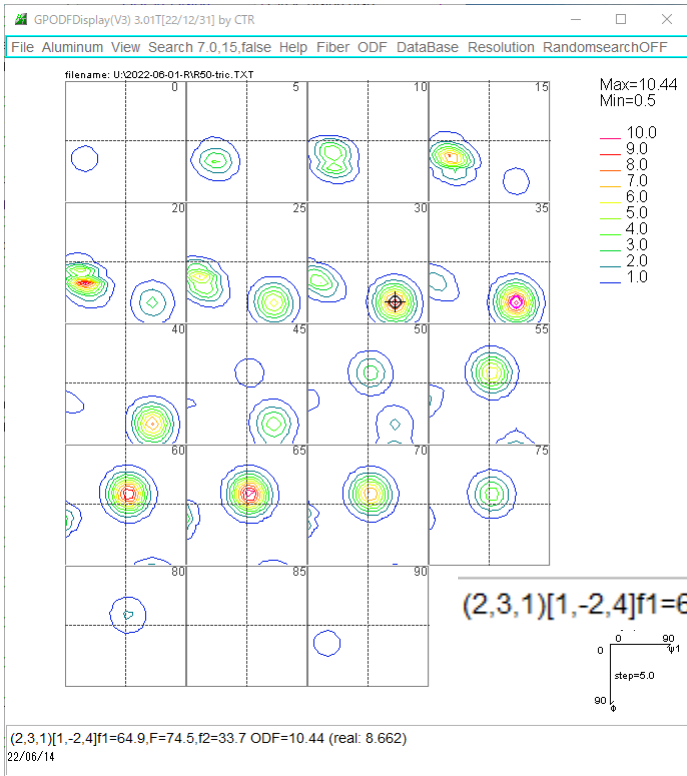
求める方位密度は指数から計算した実数の e u l e r 角度から補間された ODF の格子点密度を求める

R方位をTriclinicで計算



5度間隔のODFから実数のeuler角度から方位密度を求める

Orthorhombicで計算



方位密度

TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\ODFDisplay\ODF.txt

Orientation	ϕ_1	ϕ	ϕ_2	ODF(real)
(2 1 3)[-1 -4 2]	46.91	36.7	63.43	10.08
(2 3 1)[1 -2 4]	64.93	74.5	33.69	8.66
(2 1 3)[-3 -6 4]	58.98	36.7	63.43	6.82
(1 3 2)[4 -2 1]	14.96	57.69	18.43	6.44
(1 3 2)[6 -4 3]	27.03	57.69	18.43	4.3
(2 3 1)[3 -4 6]	52.87	74.5	33.69	2.64
(1 1 0)[-2 2 -5]	60.5	90.0	45.0	1.93
(2 1 2)[-1 -2 2]	63.43	48.19	63.43	1.85
(3 6 2)[8 -5 3]	18.43	73.4	26.57	1.74
(2 6 3)[3 -5 8]	63.43	64.62	18.43	1.5

MAXODF=10.44 MINIODF=0.5 (Weight=0 Cycle=1)

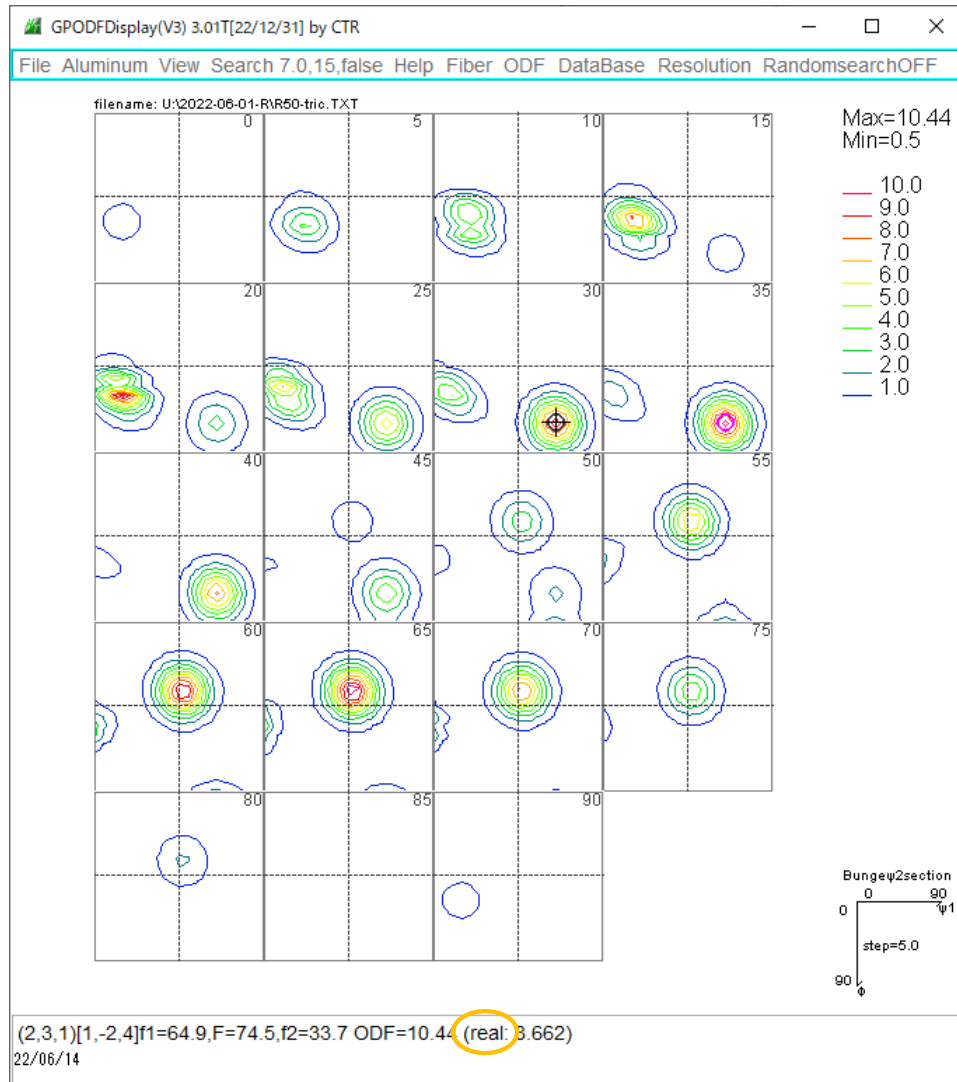
平均値

```
labotexAverage.csv - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
Averagereal{hkl}<uvw>,labotex
{001}<100>,0.5
{101}<-1-21>,0.65
{112}<-1-11>,0.6
{011}<100>,0.61
{001}<1-10>,0.5
{110}<1-11>,0.54
{111}<-1-12>,0.52
{011}<2-55>,0.5
{525}<1-51>,0.59
{013}<100>,0.54
{122}<2-21>,1.17
{113}<1-10>,0.5
{112}<1-10>,0.52
{233}<0-11>,0.78
{111}<0-11>,0.89
{213}<-1-42>,8.39
{132}<6-43>,4.59
{114}<-1-72>,0.72
{4411}<-11-118>,0.56
{001}<2-10>,0.5
{012}<100>,0.62
{113}<-3-32>,0.56
{362}<8-53>,1.25
{011}<5-22>,1.08
```

上記方位密度は、小数点3桁で四捨五入
平均値は実数の加算結果を四捨五入

euler 角度実数から求めた方位密度

手入力モード



方位密度

TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\ODFDisplay\ODF.txt

File Help

Orientation	φ1	Φ	φ2	ODF(real)
(2 1 3)[-1 -4 2]	46.91	36.7	63.43	10.08
(2 3 1)[-1 -2 4]	64.93	74.5	33.69	8.66
(2 1 3)[-3 -6 4]	58.98	36.7	63.43	6.82
(1 3 2)[4 -2 1]	14.96	57.69	18.43	6.44
(1 3 2)[6 -4 3]	27.03	57.69	18.43	4.3
(2 3 1)[3 -4 6]	52.87	74.5	33.69	2.64
(1 1 0)[-2 -2 -5]	60.5	90.0	45.0	1.93
(2 1 2)[-1 -2 2]	63.43	48.19	63.43	1.85
(3 6 2)[8 -5 3]	18.43	73.4	26.57	1.74
(2 6 3)[3 -5 8]	63.43	64.62	18.43	1.5

MAXODF=10.44 MINIODF=0.5 (Weight=0 Cycle=1)

labotexAverage.csv - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

```
Average(real[hkl]<uvw>,labotex
{001}<100>,0.5
{101}<-1-21>,0.65
{112}<-1-11>,0.6
{011}<100>,0.61
{001}<1-10>,0.5
{110}<1-11>,0.54
{111}<-1-12>,0.52
{011}<2-55>,0.5
{525}<1-51>,0.59
{013}<100>,0.54
{122}<2-21>,1.17
{113}<1-10>,0.5
{112}<1-10>,0.52
{233}<0-11>,0.78
{111}<0-11>,0.89
{213}<-1-42>,8.39
{132}<6-43>,4.59
{114}<-1-72>,0.72
{4411}<-11-118>,0.56
{001}<2-10>,0.5
{012}<100>,0.62
{113}<-3-32>,0.56
{362}<8-53>,1.25
{011}<5-22>,1.08
```