

GOODFDisplay(V3)による

ExportしたODF図から方位密度計算

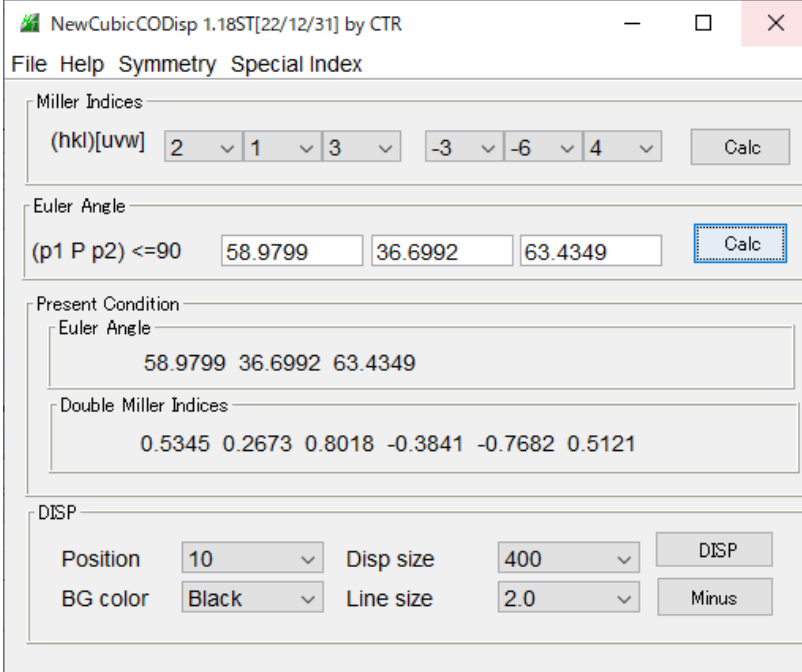
2022年06月07日

*HelperTex Office*

## 概要

各種ODFのExportファイルをGPODFDisplay (V3) ソフトウェアに読み込み  
所望の方位密度計算を行う場合、計算方法として2種類あります。

例えばS方位のeuler角度 (58.97, 36.69, 63.43) の場合



ODF 角度間隔 5 度ステップの場合

格子点位置 (60, 35, 65) の方位密度

ODF 角度間隔 1 度ステップの場合 (euler 角度の整数化)

ODF 5 度から 1 度の ODF 図を作成

格子点位置 (59, 37, 63) の方位密度

euler 角度を実数で計算する場合

(58.9799, 36.6992, 63.4349) の方位密度

GPODFDisplay では

5 度ステップを V1

1 度ステップを V2

実数計算を V3 として計算しています。

この計算方法による方位密度を考えてみます。

LaboTex ではマウス位置近傍の方位密度計算がサポートされています。

しかし、5 度間隔の ODF 図から得られる値は正確ではありません。

正確な方位密度はステップ間隔の狭い ODF 図から得られますが、

以下の説明では 5 度間隔として計算を行ってみます。

LaTeXにおけるS方位密度計算（5度間隔）

ODF図作成

Model ODF

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%

0.50 FWHM  $\phi_1$  = 15.00 45.0  
0.50 FWHM  $\Phi$  = 15.00 45.0  
0.50 FWHM  $\phi_2$  = 15.00 45.0

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\Phi$	FWHM $\phi_2$	Volume Fraction
1	{ 27.03, 57.69, 18.43}	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	15.00	15.00	15.00	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 %

Sample Name: STEST

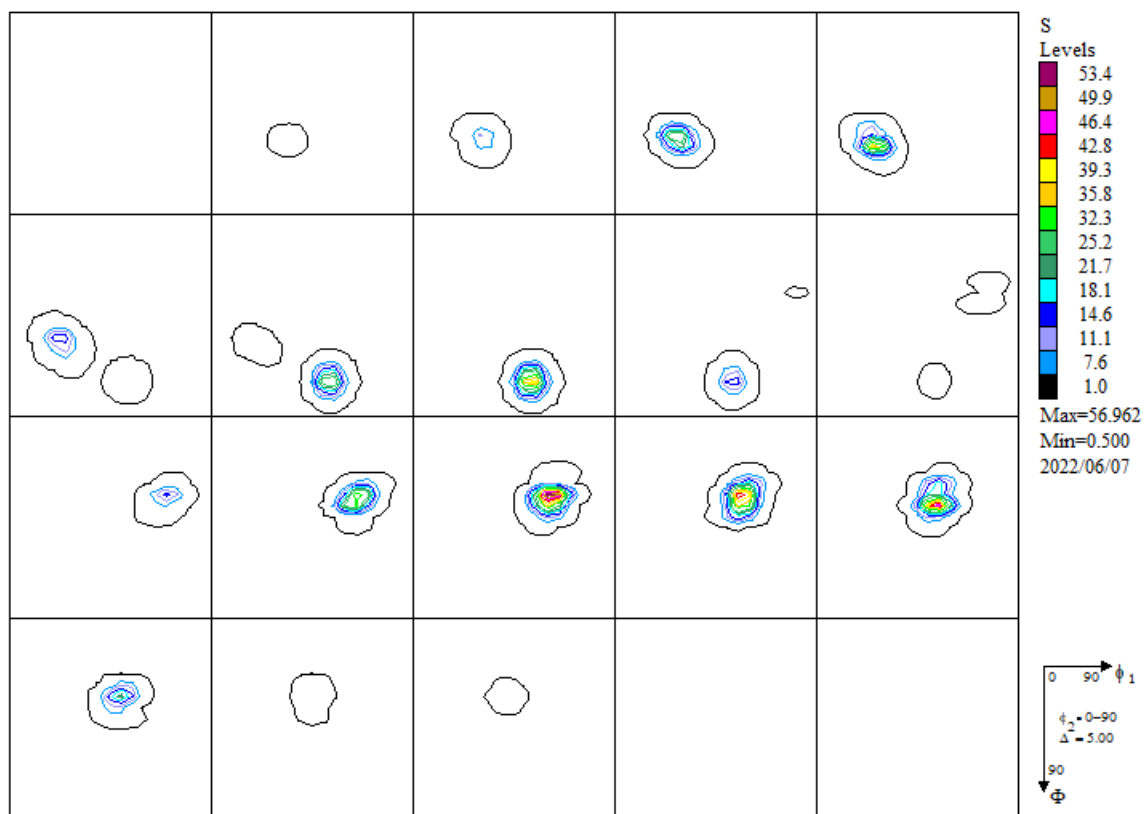
Project Name: TEST

Cell Parameters (Relative):  
a: 1.0, b: 1.0, c: 1.0  
 $\alpha$ : 90.0,  $\beta$ : 90.0,  $\gamma$ : 90.0

Max. Linearity:  Background: 50 %

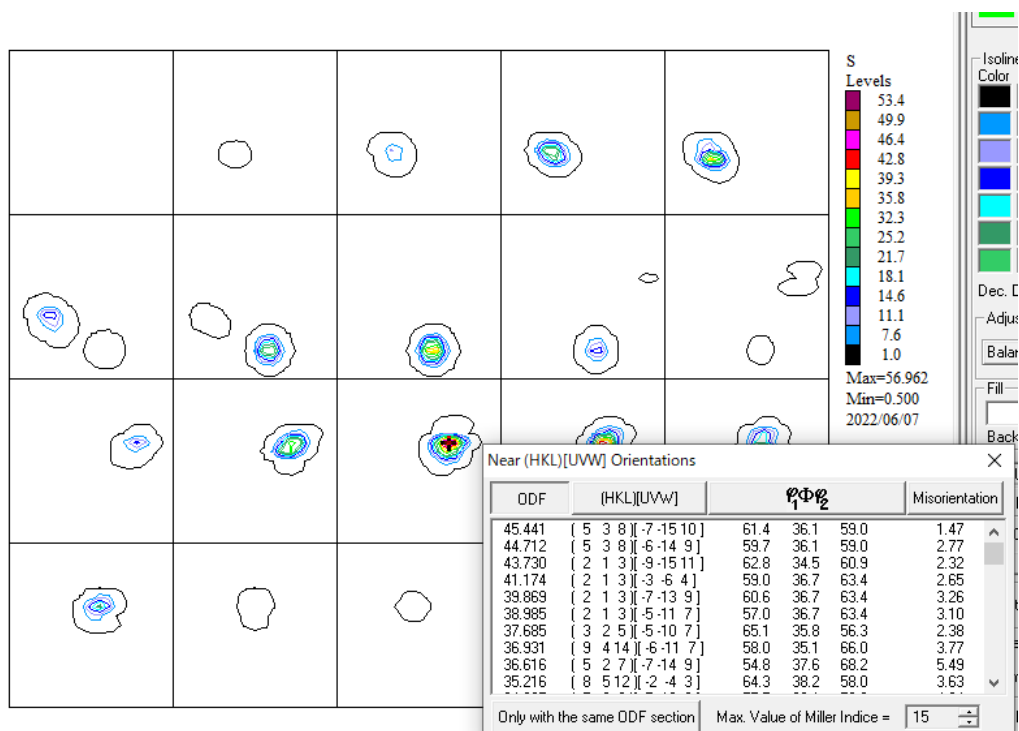
Creation of Model ODF

Exit



最大方位密度は56.962である。

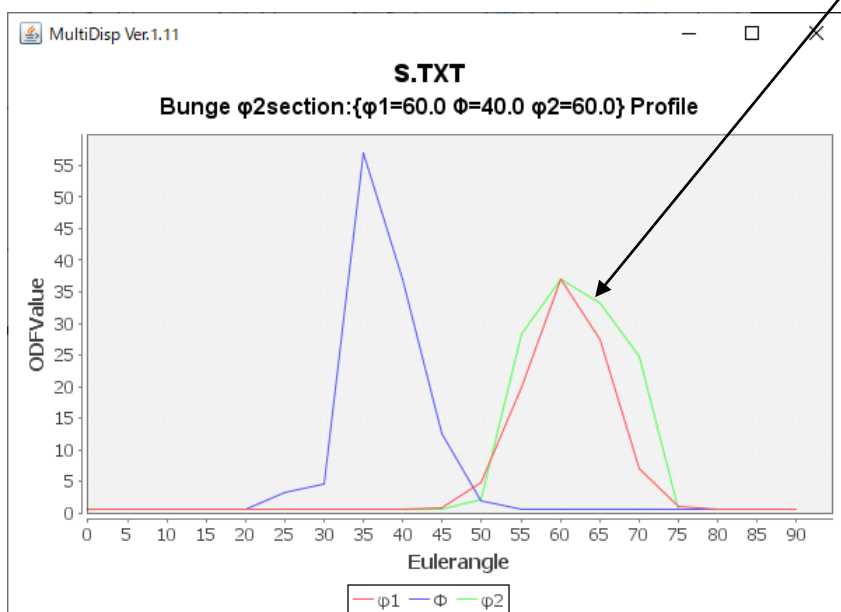
LaboTexでODF図上をマウスクリックで最大方位密度56.962に対し  
S方位は41.172が計算されている。



この計算は、5度間隔のODFデータから実数のeuler角度から補間された値と考えられます。

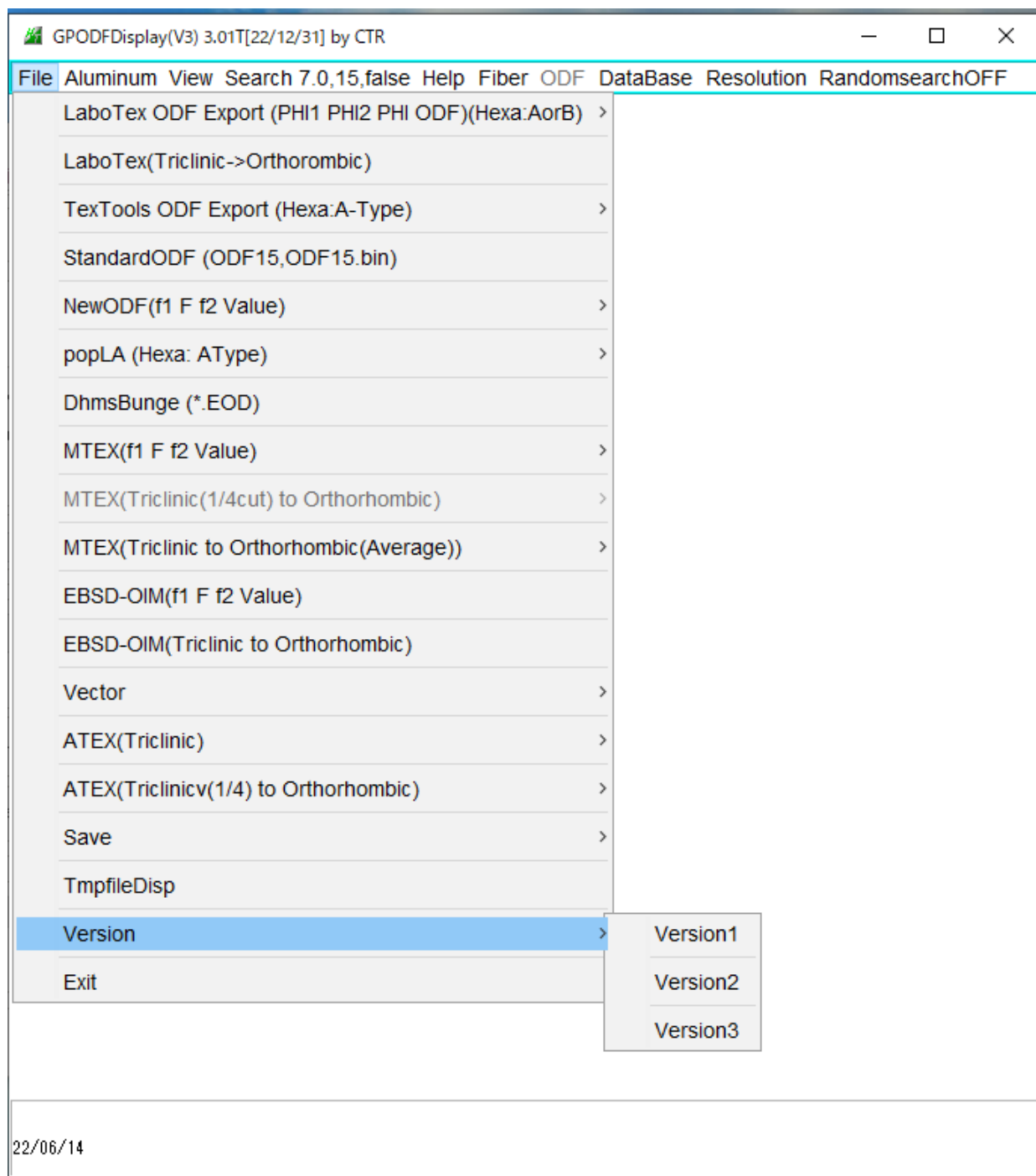
PHI1	PHI	PHI2	ODF↓
60.0	35.0	45.0	0.500472↓
60.0	35.0	50.0	2.65724↓
60.0	35.0	55.0	15.6475↓
60.0	35.0	60.0	<b>56.9621↓</b>
60.0	35.0	65.0	41.5519↓
60.0	35.0	70.0	8.74061↓
60.0	35.0	75.0	3.68426↓

S方位位置



実際の最大値は(60, 35, 60)に得られる。

GPODFDisplay (V3) では5deg, 1deg、実数の切り替えを行う



T y t l e 表示切替(実数、1deg, 5deg)を行う。

GPODFDisplayによる計算

5度の格子点から計算 (V1) GPODFDisplay(V1) 3.00T[22/12/31] by CTR

(60, 35, 65)の格子点方位密度

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

File Help

Orientation	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	ODF
(2 1 3)[-3 -6 4]	58.98	36.7	63.43	41.55
(2 3 1)[3 -4 6]	52.87	74.5	33.69	41.55
(1 3 2)[6 -4 3]	27.03	57.69	18.43	39.62
MAXODF=56.96	MINIODF=0.5 (Weight=0 Cycle=1)			

1度格子点から計算 (V2) GPODFDisplay(V2) 3.00T[22/12/31] by CTR

(59, 37, 63)の格子点方位密度

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

File Help

Orientation	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	ODF
(2 3 1)[3 -4 6]	52.87	74.5	33.69	36.09
(2 1 3)[-3 -6 4]	58.98	36.7	63.43	34.69
(1 3 2)[6 -4 3]	27.03	57.69	18.43	26.31
MAXODF=56.96	MINIODF=0.5 (Weight=0 Cycle=1)			

e u k e r 角度実数から計算 GPODFDisplay(V3) 3.00T[22/12/31] by CTR

(58.9799, 36.6992, 63.4349)の方位密度

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

File Help

Orientation	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	ODF(real)
(2 1 3)[-3 -6 4]	58.98	36.7	63.43	36.72
(2 3 1)[3 -4 6]	52.87	74.5	33.69	34.14
(1 3 2)[6 -4 3]	27.03	57.69	18.43	26.32
MAXODF=56.96	MINIODF=0.5 (Weight=0 Cycle=1)			