

2022年07月16日

HelperTex Office

概要

材料の物理特性を極点測定から ODF 解析を行い、ODF の数値解析結果を請求項としているケースがあります。

本資料では、シミュレーションから極点図を作成し、各種 ODF 解析ソフトウェアで評価してみます。

請求項

離散法 ODF 解析で計算

主方位は $\langle 111 \rangle // ND$ 方位で方位密度は 5 以上

$\{111\} \langle 112 \rangle$ 方位は 1.0 以上

$\{310\} \langle 001 \rangle$ 方位は 3.0 以下

解説

離散法 ODF 解析

ODF の解析には直接法 (ADC, WIMV) と間接法 (Herminic) があり

ADC (LaboTex, TexTools)

Herminic (StandardODF, MTEX)

離散法 ODF は直接法で ADC, WIMV 法と解釈出来ます。

主方位は $\langle 111 \rangle // ND$ 方位で方位密度は 5 以上

$\langle 111 \rangle // ND$ は γ -Fiber として

$\phi 1 = 0 - 90$ 、 $\Phi = 55$ 、 $\phi 2 = 45$ $\{111\} \langle 1-10 \rangle$ 、 $\{111\} \langle 1-21 \rangle$
とされるが、実際は幅が存在する。

最大方位密度位置が計算上の $\langle 111 \rangle // ND$ からシフトする事もある

$\langle 111 \rangle // ND$ の最小値が 5 以上と解釈できる

$\{111\} \langle 112 \rangle$ 方位は 1.0 以上

同上

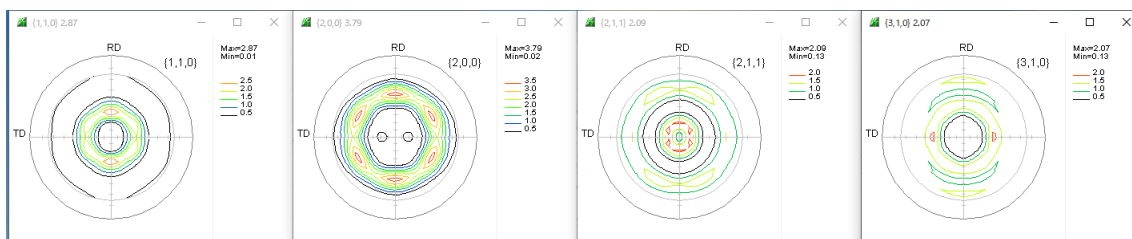
$\{310\} \langle 001 \rangle$ 方位は 3.0 以下

同上

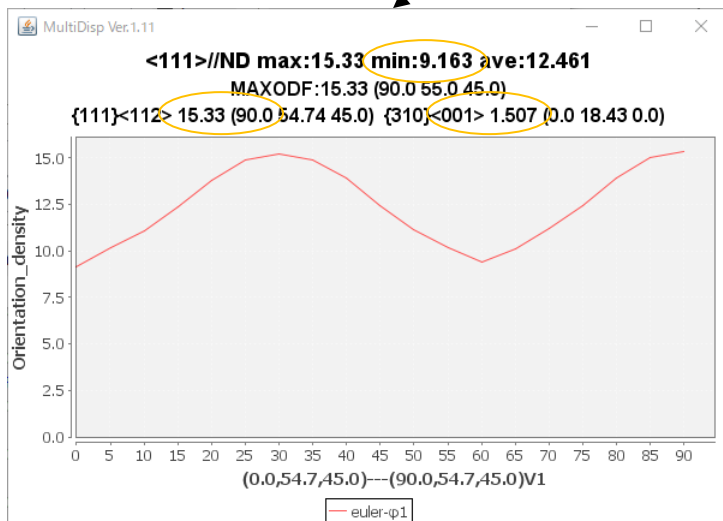
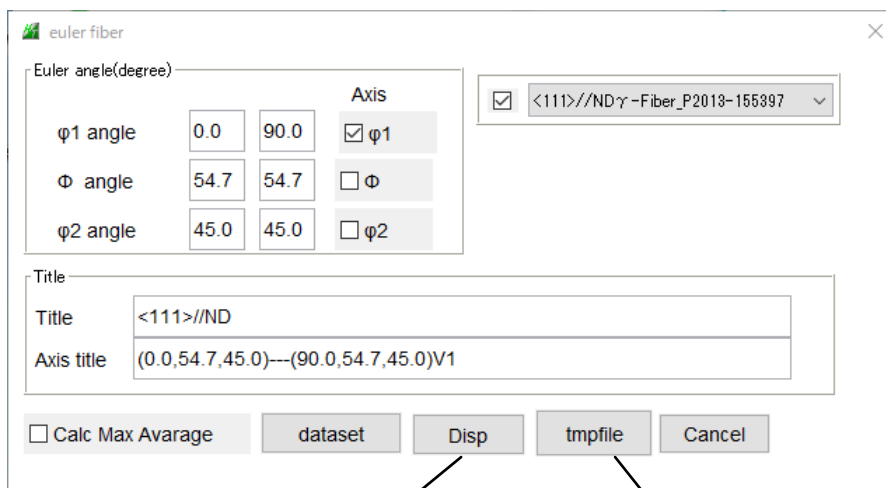
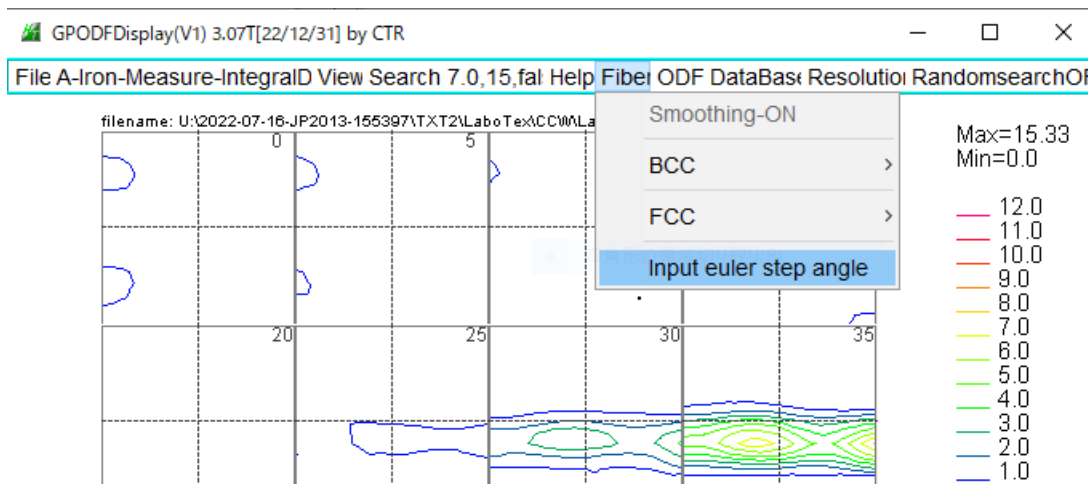
シミュレーション

$\{111\} \langle 112 \rangle$ の $\phi 1$ 方向を比較的広くし、最小値が 5 以上とし

$\{310\} \langle 001 \rangle$ を多少含ませる



計算はGPODFDisplayソフトウェアのFiber解析で行う



J:\2022-07-16-JP2013-155397\TXT2\LaboTex\CCW\LaboTex.TXT

```

<111>//ND max:15.33 min:9.163 ave:12.461
(0.0,54.7,45.0)---(90.0,54.7,45.0)V1
MAXODF:15.33 (90.0 55.0 45.0)
{111}<112> >10.0
(111)[-1-12] :15.33 (90.0 54.74 45.0)
(111)[1-21] :15.241 (30.0 54.74 45.0)
{111}<112> 15.33 (90.0 54.74 45.0)
{310}<001> <3.0
(310)[001] :1.488 (90.0 90.0 71.57)
(031)[100] :1.47 (0.0 71.57 0.0)
(013)[100] :1.507 (0.0 18.43 0.0)
(130)[001] :1.488 (90.0 90.0 18.43)
(103)[0-10] :1.488 (0.0 18.43 90.0)
{310}<001> 1.507 (0.0 18.43 0.0)
    
```

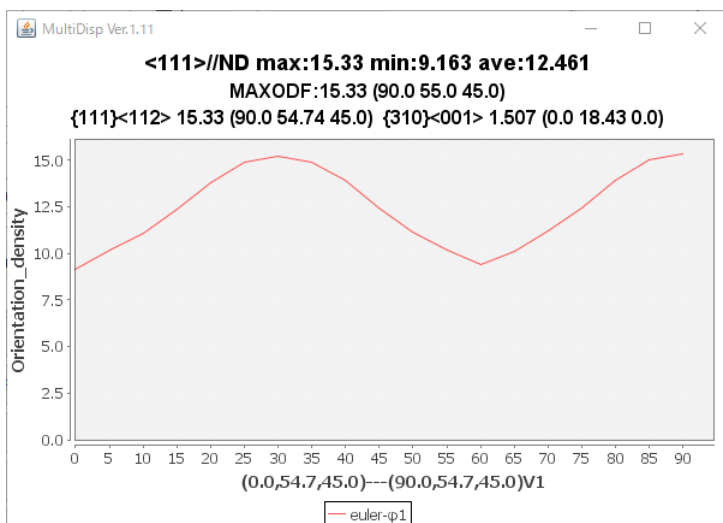
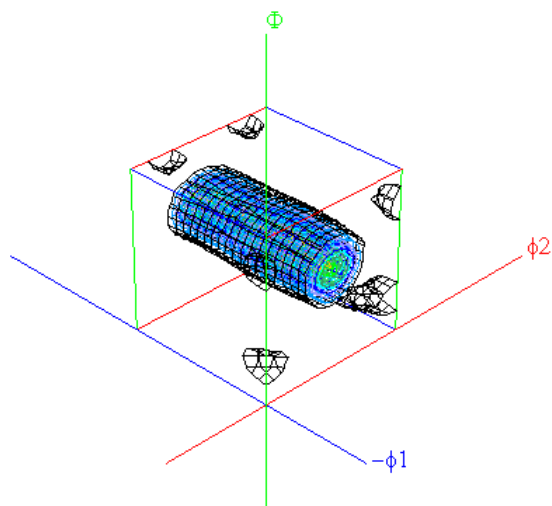
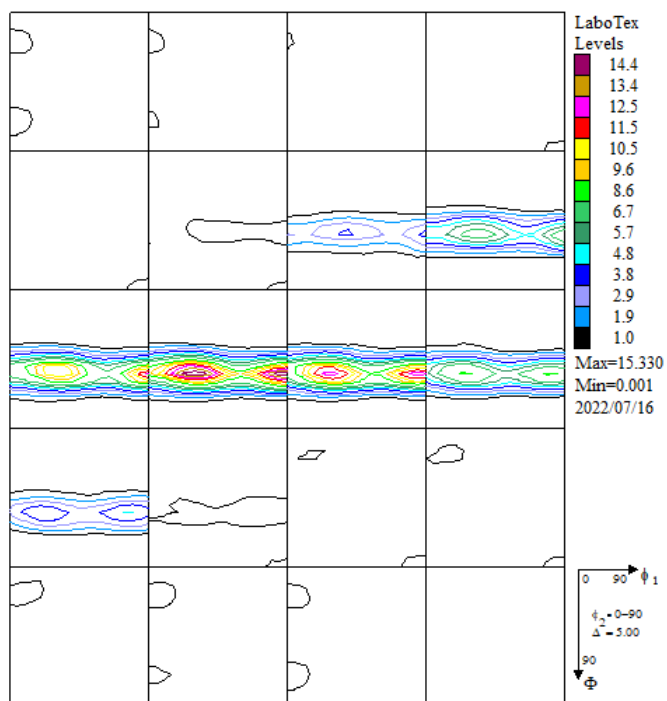
$\langle 111 \rangle // ND$ の最小密度 (min) が 5.0 以上

主方位はMAXODFで $\{111\} \langle 112 \rangle$ と一致するか判断

$\{111\} \langle 112 \rangle$ の方位密度が 10.0 以上か判断 (対称方位の最大値)

$\{310\} \langle 001 \rangle$ が 3.0 以下か判断 (対称方位の最大値)

LaboTexで解析



J:\2022-07-16-JP2013-155397\TXT2\LaboTex\CCWL\LaboTex.TXT

<111>//ND max:15.33 min:9.163 ave:12.461

(0.0,54.7,45.0)---(90.0,54.7,45.0)V1

MAXODF:15.33 (90.0 55.0 45.0)

{111}<112> >10.0

(111)[-1-12] :15.33 (90.0 54.74 45.0)

(111)[1-21] :15.241 (30.0 54.74 45.0)

{111}<112> 15.33 (90.0 54.74 45.0)

{310}<001> <3.0

(310)[001] :1.488 (90.0 90.0 71.57)

(031)[100] :1.47 (0.0 71.57 0.0)

(013)[100] :1.507 (0.0 18.43 0.0)

(130){001} :1.488 (90.0 90.0 18.43)

(103)[0-10] :1.488 (0.0 18.43 90.0)

{310}<001> 1.507 (0.0 18.43 0.0)

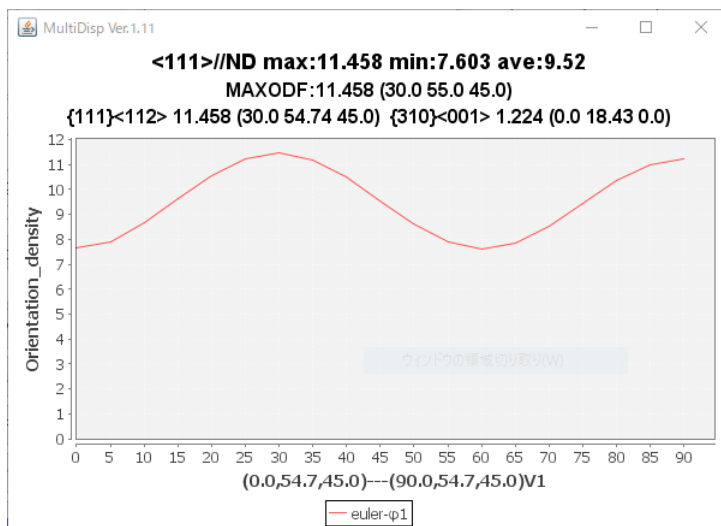
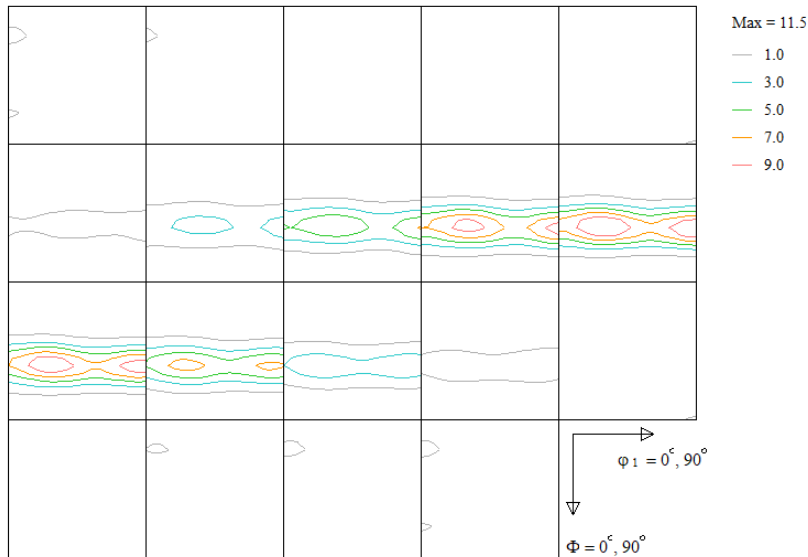
<111>//ND の最小値は 9.163 >5

主方位は 15.33

{111}<112> は 15.33 >10

{310}<001>は 1.507 <3

TexToolsで解析



J:\2022-07-16-JP2013-155397\TXT2\TexTools\TexTools.HODF

<111>//ND max:11.458 min:7.603 ave:9.52

(0.0,54.7,45.0)---(90.0,54.7,45.0)V1

MAXODF:11.458 (30.0 55.0 45.0)

{111}<112> >10.0

(111)[-1-12] :11.238 (90.0 54.74 45.0)

(111)[1-21] :11.458 (30.0 54.74 45.0)

{111}<112> 11.458 (30.0 54.74 45.0)

{310}<001> <3.0

(310)[001] :1.075 (90.0 90.0 71.57)

(031)[100] :1.09 (0.0 71.57 0.0)

(013)[100] :1.224 (0.0 18.43 0.0)

(130){001} :1.075 (90.0 90.0 18.43)

(103)[0-10] :1.075 (0.0 18.43 90.0)

{310}<001> 1.224 (0.0 18.43 0.0)

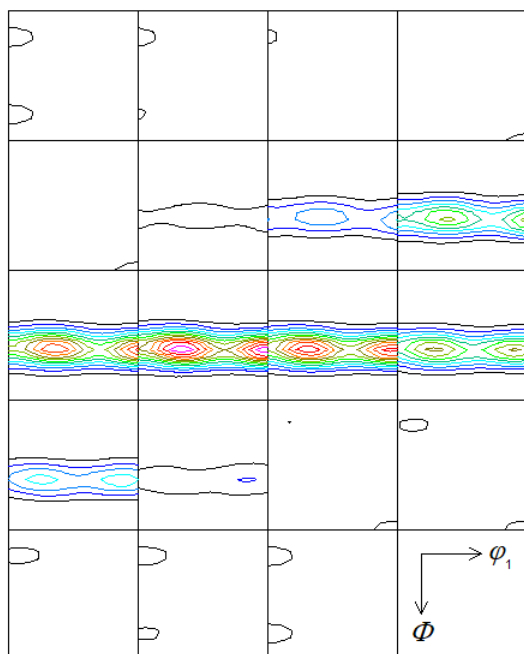
<111>//ND の最小値は 7.603 >5

主方位は 11.458

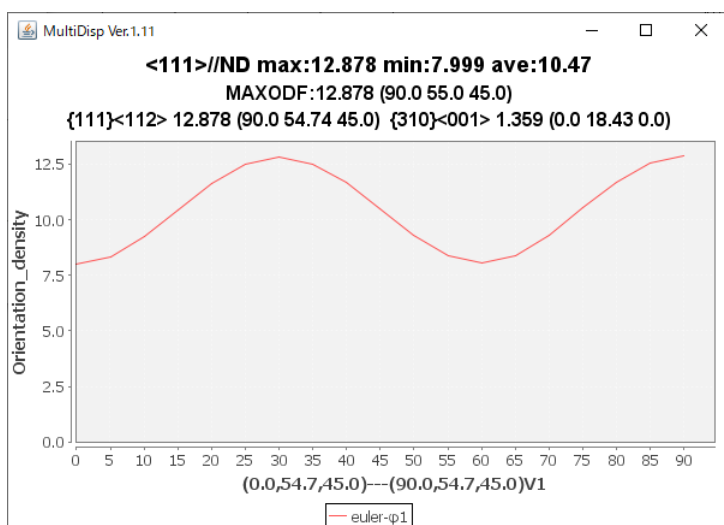
{111}<112> は 11.458 >10

{310}<001>は 1.224 <3

StandardODFでは



Contour Levels: 1.0 2.0 3.0 4.0 5.0 6.0 7.0 8.0 9.0 10.0 11.0 12.0



J:\2022-07-16-JP2013-155397\TXT2\StandardODF\ODF15

<111>//ND max:12.878 min:7.999 ave:10.47

(0.0,54.7,45.0)--(90.0,54.7,45.0)V1

MAXODF:12.878 (90.0 55.0 45.0)

{111}<112> >10.0

(111)[-1-12] :12.878 (90.0 54.74 45.0)

(111)[1-21] :12.823 (30.0 54.74 45.0)

{111}<112> 12.878 (90.0 54.74 45.0)

{310}<001> <3.0

(310)[001] :1.359 (90.0 90.0 71.57)

(031)[100] :1.359 (0.0 71.57 0.0)

(013)[100] :1.359 (0.0 18.43 0.0)

(130){001} :1.359 (90.0 90.0 18.43)

(103)[0-10] :1.359 (0.0 18.43 90.0)

{310}<001> 1.359 (0.0 18.43 0.0)

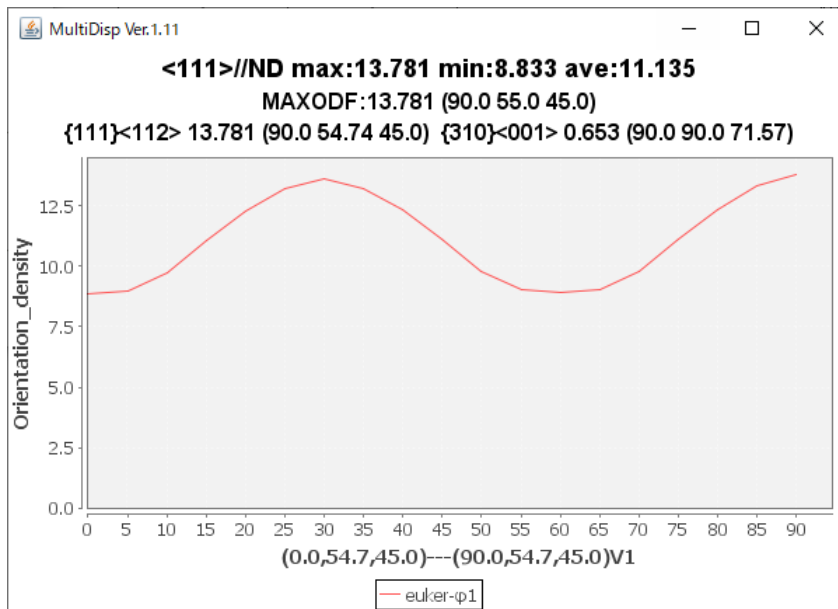
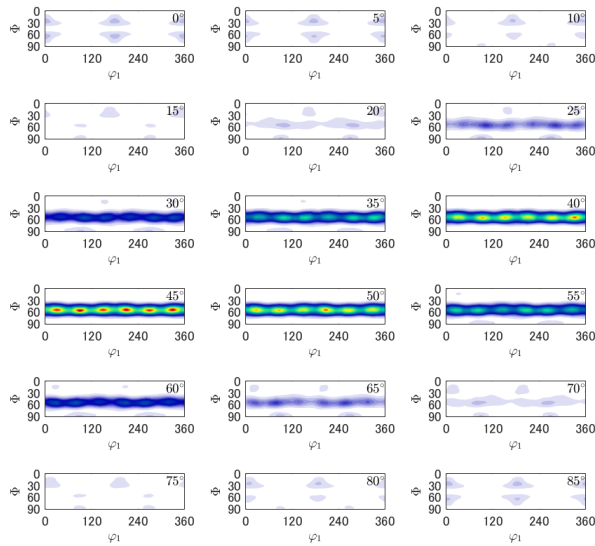
<111>//ND の最小値は 7.999 >5

主方位は 12.878

{111}<112> は 12.878 >10

{310}<001>は 1.359 <3

MTEXでは



U:\2022-07-16-JP2013-155397\TXT2\MTEX\MTEXODF.txt

<111>//ND max:13.781 min:8.833 ave:11.135

(0.0,54.7,45.0)---(90.0,54.7,45.0)V1

MAXODF:13.781 (90.0 55.0 45.0)

{111}<112> >10.0

(111)[-1-12] :13.781 (90.0 54.74 45.0)

(111)[1-21] :13.638 (30.0 54.74 45.0)

{111}<112> 13.781 (90.0 54.74 45.0)

{310}<001> <3.0

(310)[001] :0.653 (90.0 90.0 71.57)

(031)[100] :0.653 (0.0 71.57 0.0)

(013)[100] :0.653 (0.0 18.43 0.0)

(130)[001] :0.653 (90.0 90.0 18.43)

(103)[0-10] :0.653 (0.0 18.43 90.0)

{310}<001> >0.653 (90.0 90.0 71.57)

<111>//ND の最小値は 8.833 >5

主方位は 13.781

{111}<112> は 13.781 >10

{310}<001>は 0.653 <3

まとめ

シュミレーションでは、LaboTexでModellingを行い、極点図をExportし
反射極点図 $\{110\}$ 、 $\{200\}$ 、 $\{211\}$ 、 $\{310\}$ を作成し
各種ODFで解析を行った結果以下の値が得られた。

	$\langle 111 \rangle // ND$ 最小値	主方位密度	$\{111\} \langle 112 \rangle$ 方位密度	$\{310\} \langle 001 \rangle$ 方位密度
LaboTex	9.163	15.33	15.33	1.488
TexTools	7.603	11.458	11.458	1.075
StandardODF	7.999	12.878	12.878	1.359
MTEX	8.833	13.781	13.781	0.653

この値はシュミレーション結果であり、測定データではありません。

測定データでは最大方位密度位置と $\{111\} \langle 112 \rangle$ にずれが発生する事があります。

euler角度を比較しながら確認を行ってください。

測定データの場合、主方位以外に多数の方位やrandomも存在する事もあり、
シュミレーション結果とは異なります。測定データの信頼性評価が重要になります。