

ODF解析におけるVolume Fractionと方位密度

2022年07月25日

HelperTex Office

概要

極点図から方位密度を求める場合、XRDでは、極点測定が行われる。

極点測定では、通常 α 方向、 β 方向のステップ間隔は5度で測定が行われている。

この測定ステップ間隔とODF解析時のステップ間隔は同一でODFは($\phi 1$, Φ , $\phi 2$)は(19, 19, 19)データで表現される。

求める方位がこのODFの格子点からずれると正確な方位密度は求められません。

一部のODFソフトウェアでは、格子点密度の補間がおこなわれています。

本資料では{110} <001>、{111} <112>、{322} <236>に関して方位密度の関係を評価します。

VF%=33%で3方向euler角度の広がりをもFWHM=5degとして計算

VF%が同一であれば、方位密度は

{110} <001> : {111} <112> : {322} <236> = 4 : 2 : 1である。

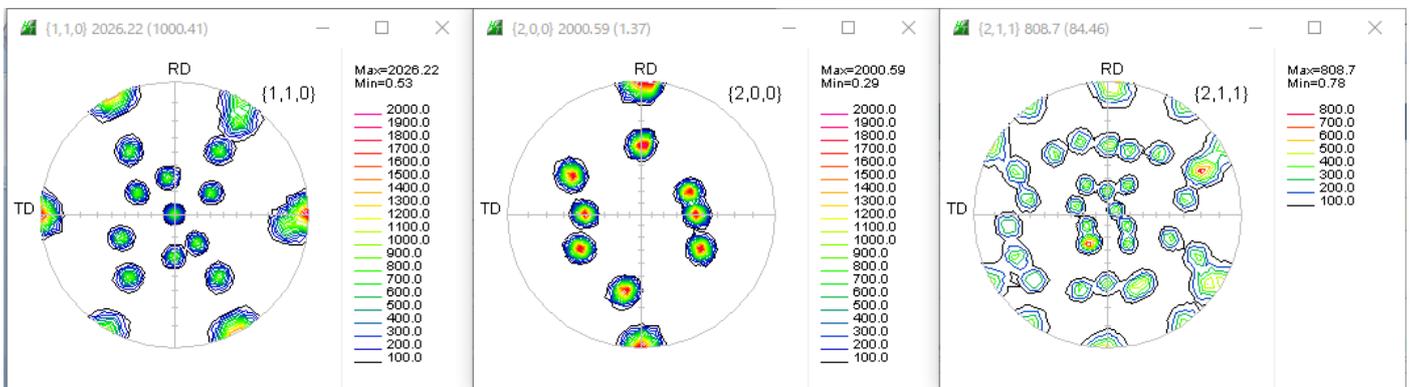
この評価を各種ODFソフトウェアで行ってみます。

データ作成

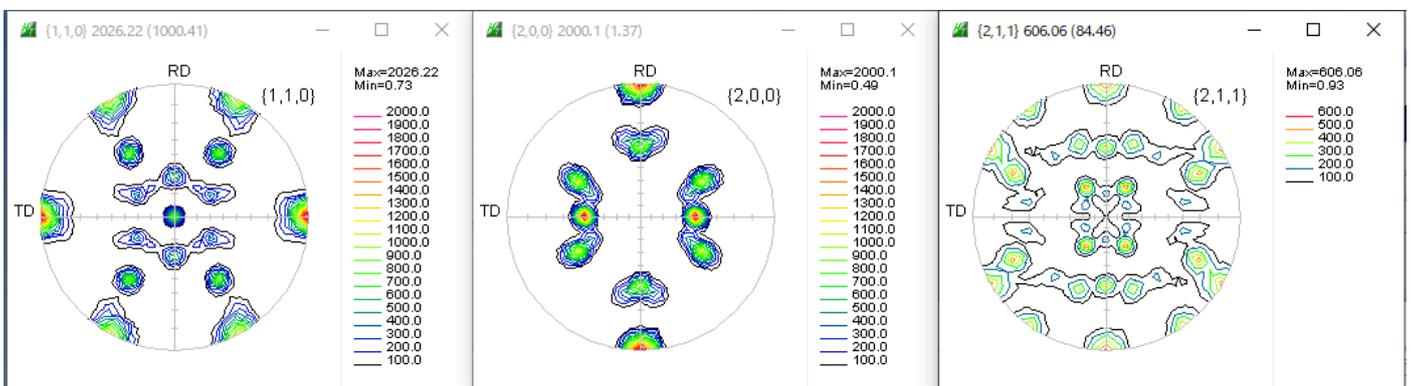
step = 5 deg

```
cs = crystalSymmetry('cubic')
ss= specimenSymmetry('triclinic')
odfr = uniformODF(cs,ss)
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)
ori = orientation.byMiller([1,1,0],[0,0,1],cs,ss)
odfg = unimodalODF(ori,psi)
ori223 = orientation.byMiller([2,2,3],[3,-6,2],cs,ss)
odf223=unimodalODF(ori223,psi)
ori111 = orientation.byMiller([1,1,1],[-1,-1,2],cs,ss)
odf111=unimodalODF(ori111,psi)
odf=odfr+33*odfg+33*odf223+33*odf111
h = { Miller(1,1,0,cs), Miller(2,0,0,cs),Miller(2,1,1,cs)}
rpf=calcPOleFigure(odf,h)
```

(1 9, 1 9, 1 9) の格子点 ODF から計算された極点図



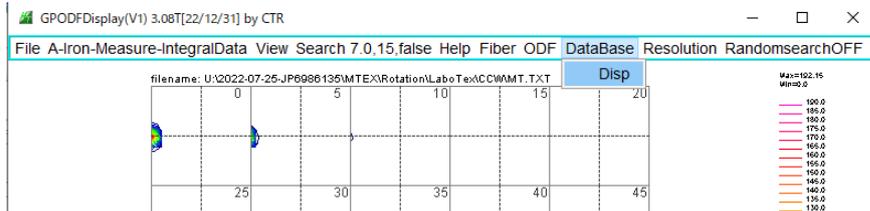
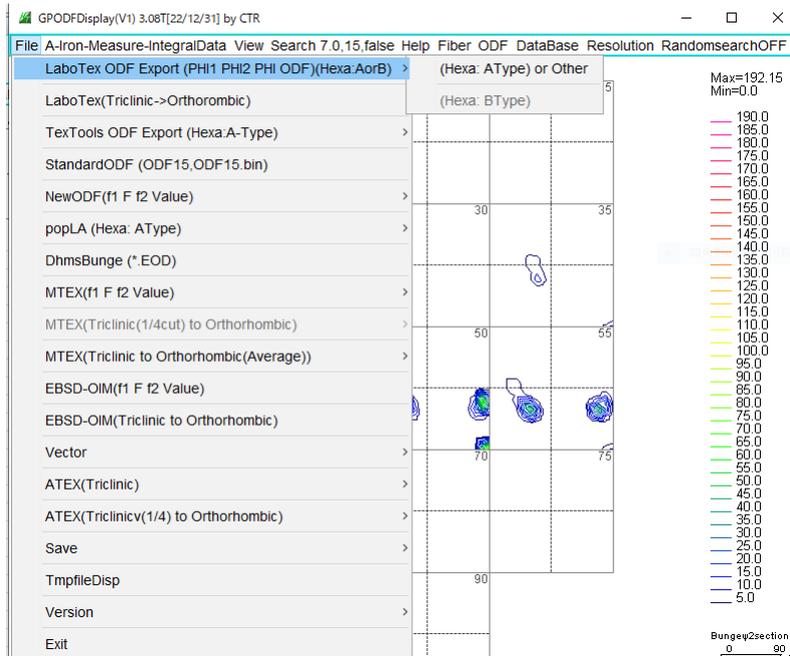
対称極点図を処理 (P F R o t a t i o nによるO r t h o r h o m b i c化)



この完全極点図から各種 ODF で解析比較を行う。

方位密度計算

各種 ODF の Export データより



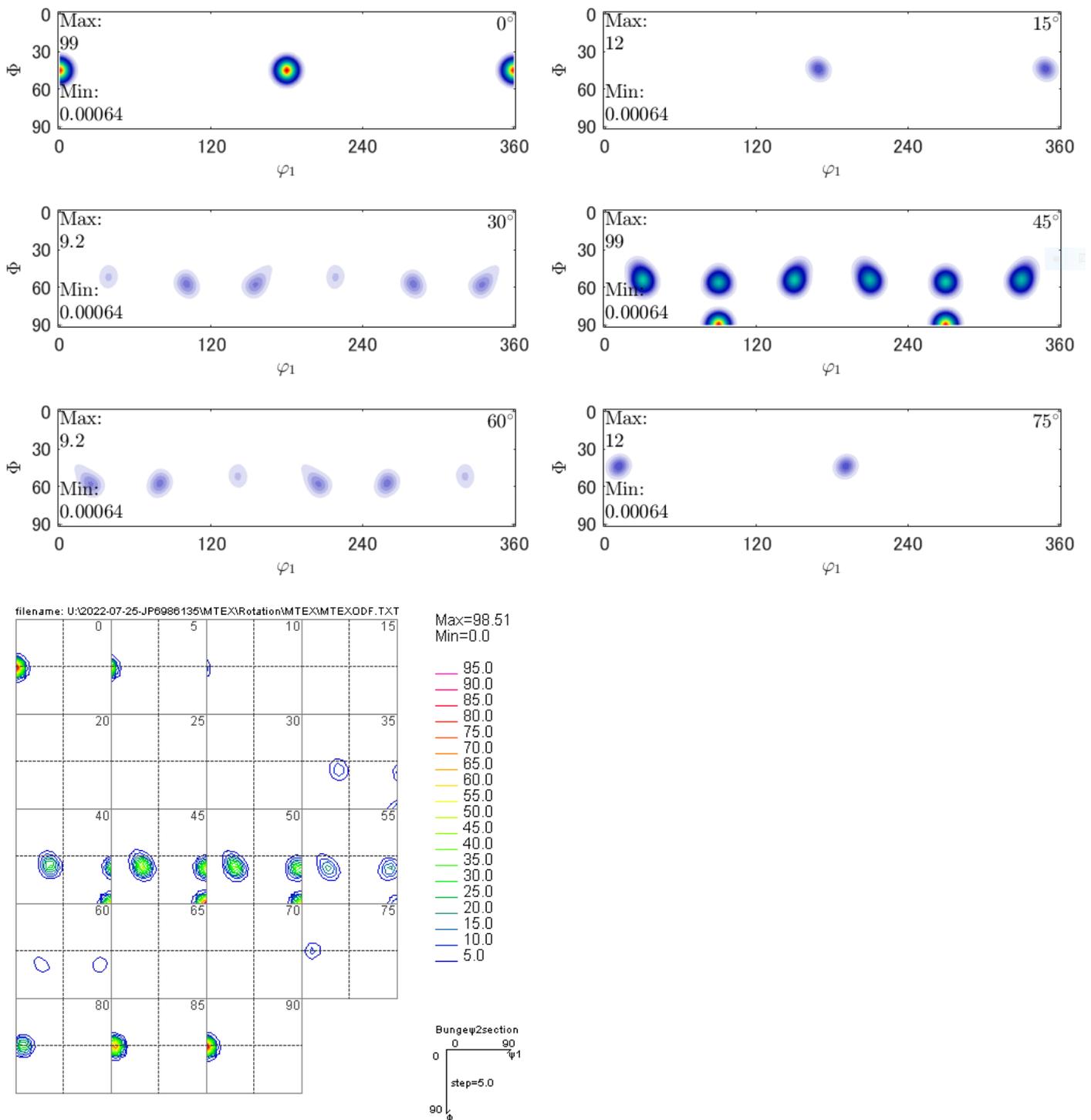
計算方位を選択

<input type="checkbox"/> {0 0 1} <-1 0 0> cube	<input type="checkbox"/> {1 0 1} <-1 -2 1> Brass	<input type="checkbox"/> {1 1 2} <-1 -1 1> copper	<input checked="" type="checkbox"/> {0 1 1} <-1 0 0> Goss
<input type="checkbox"/> {0 0 1} <-1 -1 0> RW(or H)	<input type="checkbox"/> {1 1 0} <-1 -1 1> P	<input checked="" type="checkbox"/> {1 1 1} <-1 -1 2>	<input type="checkbox"/> {0 1 1} <-2 -5 5>
<input type="checkbox"/> {5 2 5} <-1 -5 1>	<input type="checkbox"/> {0 1 3} <-1 0 0>	<input type="checkbox"/> {1 2 2} <-2 -2 1>	<input type="checkbox"/> {1 1 3} <-1 -1 0>
<input type="checkbox"/> {1 1 2} <-1 -1 0>	<input type="checkbox"/> {2 3 3} <-0 -1 1>	<input type="checkbox"/> {1 1 1} <-0 -1 1>	<input type="checkbox"/> {2 1 3} <-1 -4 2> R
<input type="checkbox"/> {2 1 3} <-3 -6 4> S	<input type="checkbox"/> {1 1 4} <-1 -7 2>	<input type="checkbox"/> {4 4 11} <-11 -11 8> Taylor	<input type="checkbox"/> {0 0 1} <-2 -1 0> CH
<input type="checkbox"/> {0 1 2} <-1 0 0> Q1	<input type="checkbox"/> {1 1 3} <-3 -3 2> Q2	<input type="checkbox"/> {3 6 2} <-8 -5 3> Q3	<input type="checkbox"/> {0 1 1} <-5 -2 2> L
<input type="checkbox"/> {1 0 0} <-0 1 3> CR	<input type="checkbox"/> {4 -1 1} <-1 -4 8>	<input type="checkbox"/> {5 4 5} <-2 -5 2>	<input checked="" type="checkbox"/> {2 2 3} <-3 -6 2>

等価な方位も計算



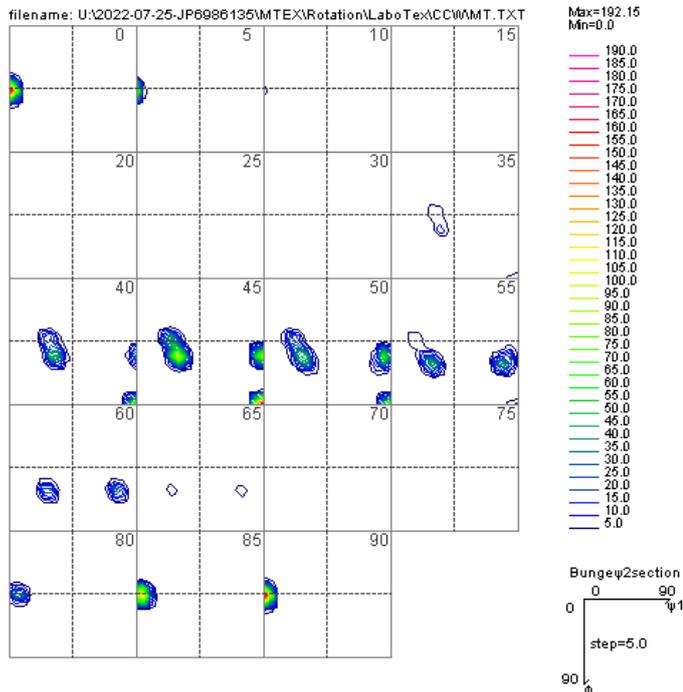
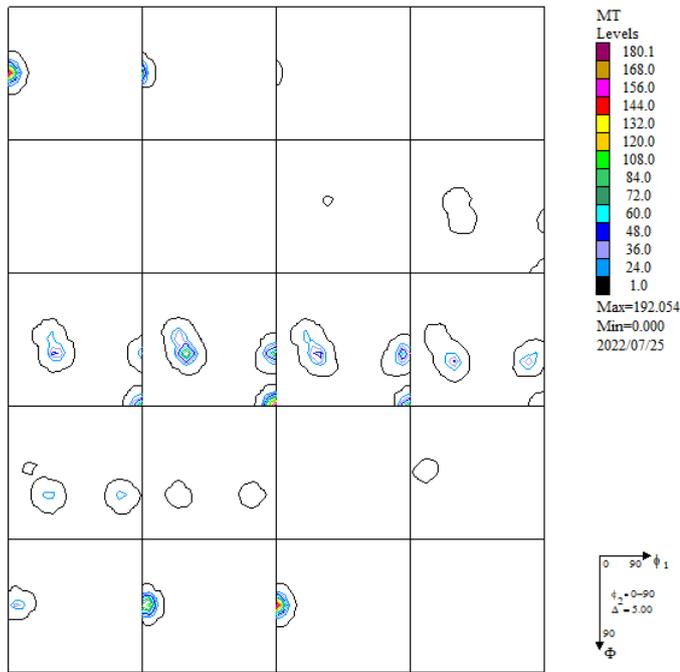
MTEXで解析



GPODFDisplayによる方位密度計算 (近傍の格子点密度)

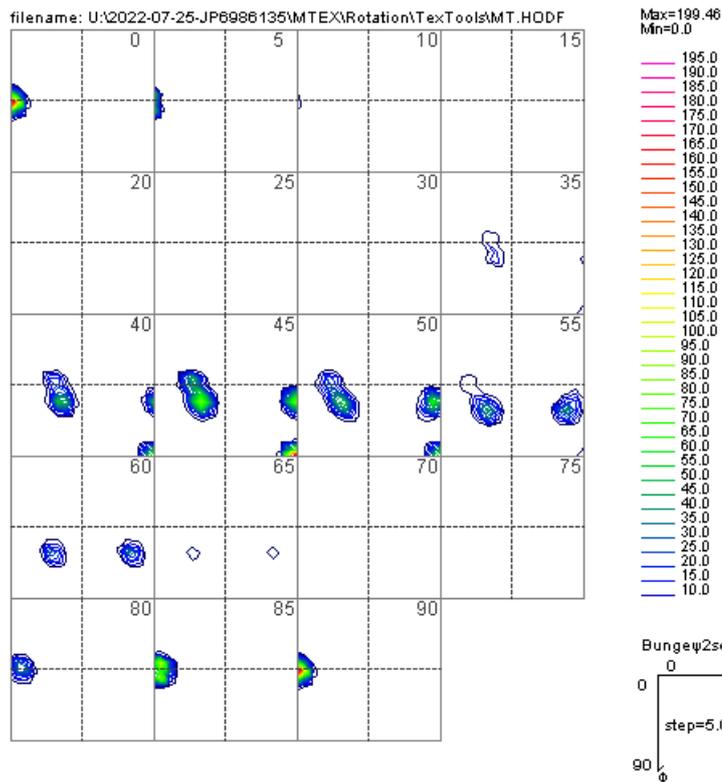
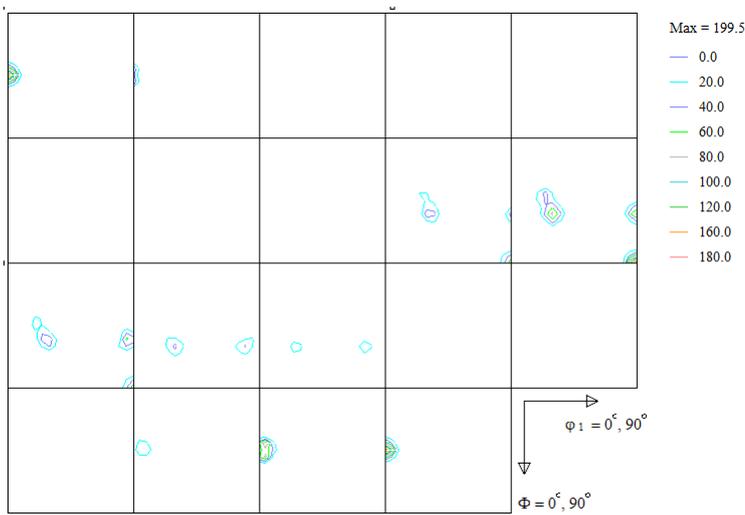
Orientation	φ_1	Φ	φ_2	ODF
(0 1 1)[1 0 0]	0.0	45.0	0.0	98.51
(1 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	45.0	98.51
(1 0 1)[0 -1 0]	0.0	45.0	90.0	98.51
(1 1 1)[-1 -1 2]	90.0	54.74	45.0	53.45
(1 1 1)[1 -2 1]	30.0	54.74	45.0	52.5
(2 3 2)[-3 -2 6]	78.57	60.98	56.31	16.68
(2 2 3)[3 -6 2]	24.61	43.31	45.0	16.56
(3 2 2)[2 -6 3]	29.35	60.98	56.31	15.49

LaboTexで解析



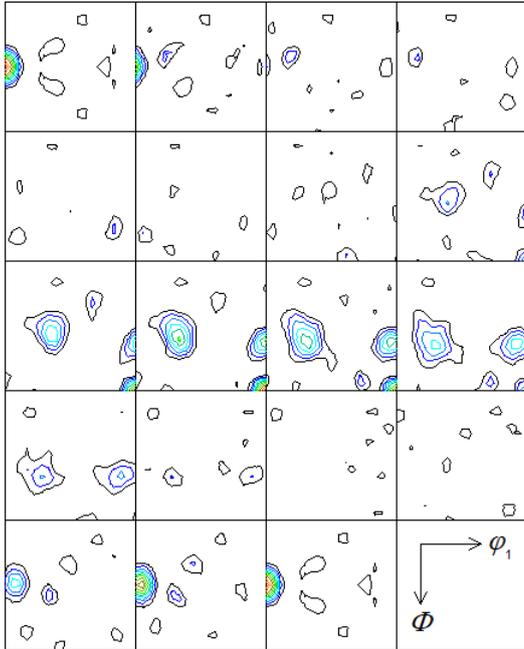
Orientation	ϕ_1	Φ	ϕ_2	ODF
(0 1 1)[1 0 0]	0.0	45.0	0.0	192.15
(1 0 1)[0 -1 0]	0.0	45.0	90.0	192.15
(1 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	45.0	191.44
(1 1 1)[1 -2 1]	30.0	54.74	45.0	103.47
(1 1 1)[-1 -1 2]	90.0	54.74	45.0	92.63
(3 2 2)[2 -6 3]	29.35	60.98	56.31	49.9
(2 2 3)[3 -6 2]	24.61	43.31	45.0	47.84
(2 3 2)[-3 -2 6]	78.57	60.98	56.31	45.77

TexToolsで解析



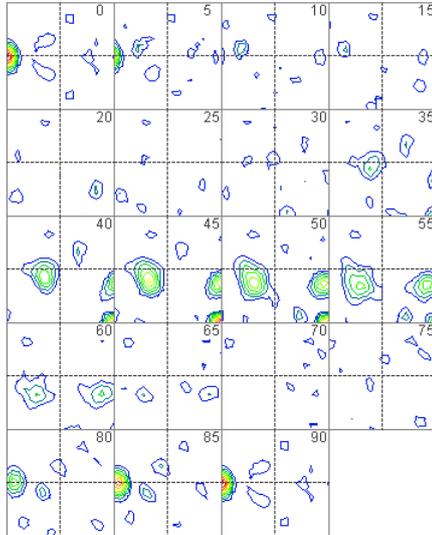
Orientation	ϕ_1	Φ	ϕ_2	ODF
(1 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	45.0	199.46
(0 1 1)[1 0 0]	0.0	45.0	0.0	197.6
(1 0 1)[0 -1 0]	0.0	45.0	90.0	197.6
(1 1 1)[1 -2 1]	30.0	54.74	45.0	85.83
(1 1 1)[-1 -1 2]	90.0	54.74	45.0	84.32
(3 2 2)[2 -6 3]	29.35	60.98	56.31	46.08
(2 2 3)[3 -6 2]	24.61	43.31	45.0	44.27
(2 3 2)[-3 -2 6]	78.57	60.98	56.31	41.87

Standard ODF

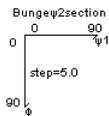


Contour Levels: 5.0 10.0 15.0 20.0 25.0 30.0 35.0 40.0 45.0 50.0

filename: U:\2022-07-25-JP6996135\MTEX\Rotation\StandardODF\ODF15



Max=54.81
Min=-10.82



Orientation	ϕ_1	Φ	ϕ_2	ODF
(0 1 1)[1 0 0]	0.0	45.0	0.0	54.81
(1 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	45.0	54.81
(1 0 1)[0 -1 0]	0.0	45.0	90.0	54.81
(1 1 1)[-1 -1 2]	90.0	54.74	45.0	31.44
(1 1 1)[1 -2 1]	30.0	54.74	45.0	31.19
(2 3 2)[-3 -2 6]	78.57	60.98	56.31	21.29
(2 2 3)[3 -6 2]	24.61	43.31	45.0	21.18
(3 2 2)[2 -6 3]	29.35	60.98	56.31	20.6

MTEXでODF図を作成し、再計算極点図をExportし、完全極点図から各種ODFで解析した結果同一VF%で方位密度を求めると倍率は 4 : 2 : 1 → 1 : 0.5 : 0.25が以下の結果になりました。

	[110]<001>規格化					
	[110]<001>	[111]<112>	[322]<236>	[110]<001>	[111]<112>	[322]<236>
MTEX	98.51	53.45	16.68	1.000	0.543	0.169
LaboTex	192.15	103.47	49.9	1.000	0.538	0.260
TexTools	199.46	85.83	46.08	1.000	0.430	0.231
StandardODF	54.81	31.44	21.29	1.000	0.574	0.388

TexToolsは完全極点図の場合、適切な値が求められる。

StandardODFは最大方位密度が大きすぎるため、最大値が低く計算されています。

ODFにおける広がりを極端に狭くした結果である。

実際の測定では方位の広がりから重なりや方位のシフトが発生し、この比率がずれる可能性があります。

等価方位の最大値に対して密度の規格化を行うと

MaxOrientation	φ_1	Φ	φ_2	ODF
{0 1 1}<1 0 0> Goss	0.0	45.0	0.0	192.15
{1 1 1}<-1 -1 2>	90.0	54.74	45.0	103.47
{2 3 2}<-3 -2 6>	78.57	60.98	56.31	49.9

labotexMaxnorm.csv - メモ帳

```

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
Maxnorm{hkl}<uvw>,labotex
{011}<100>,96.08
{111}<-1-12>,103.47
{232}<-3-26>,99.79
  
```

0.5 : 1 : 2の規格化を行った密度が得られます。