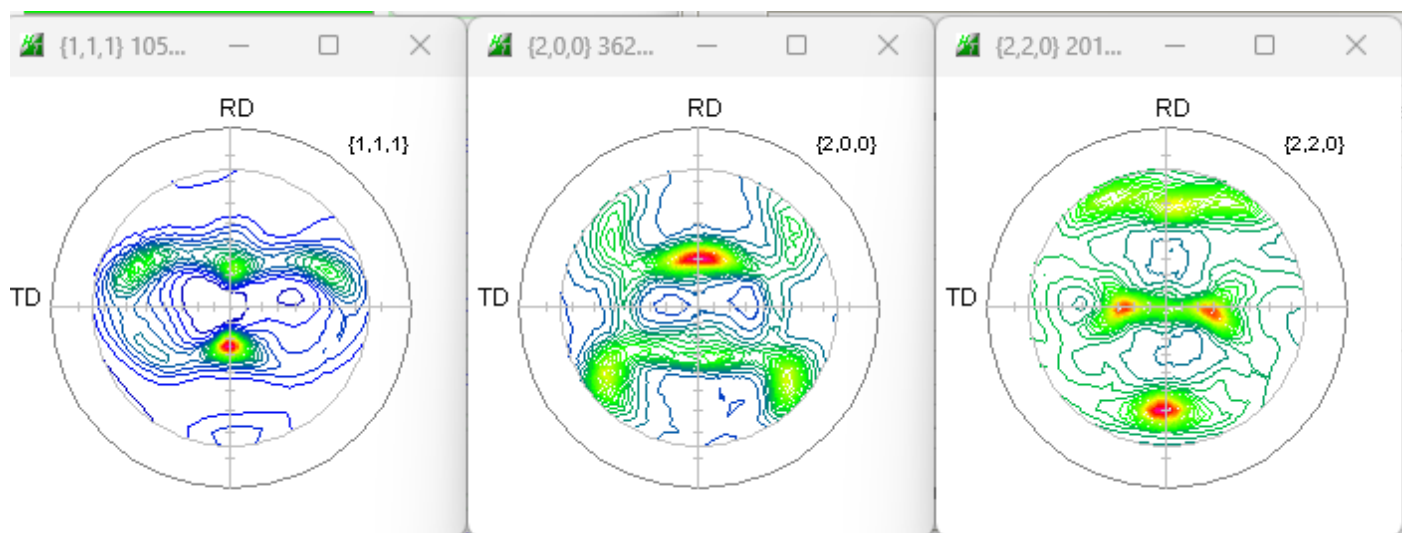


randomが存在するサンプルのVF%解析



2023年02月01日

● *HelperTex Office*

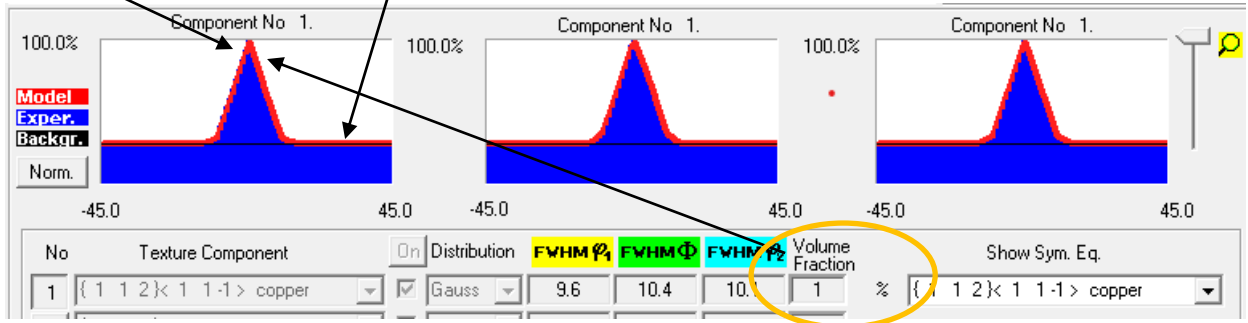
1. 概要
2. 測定データ
3. 極点処理
4. ODF解析にてrandom%を求める
 4. 1 LaboTex
 4. 2 MTEX
 4. 3 WIMV
5. VolumeFractionを求める
 5. 1 LaboTex
 5. 1. 1 VolumeFraction評価
 5. 2 newODF
6. LaboTexのVolumeFractionを求める注意点

1. 概要

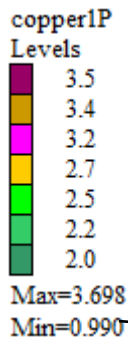
ODFによる方位の定量としてVolume Fraction (VF%)があり、複数のソフトウェアでサポートされています。しかし、定量結果の評価基準が曖昧になっています。

本資料では、randomが残っている極点図を用い、最初にrandom定量 (random%)を行い、VF%計算時、予め求めていたrandom%が一致した時点でVF%の計算を終了とし求めたVF%の評価を行ってみます。

copperが1% (VF%=1%)、他はrandom

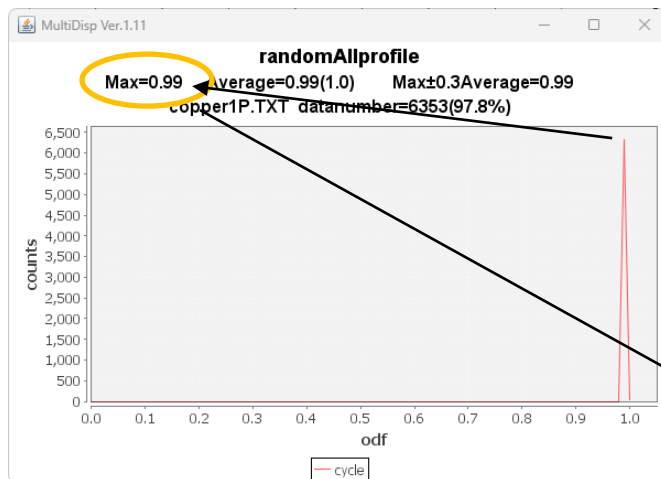


ODF図表示の等高線部分



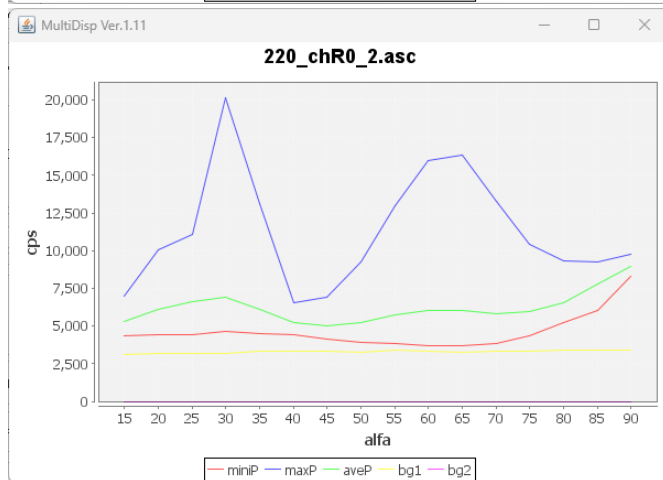
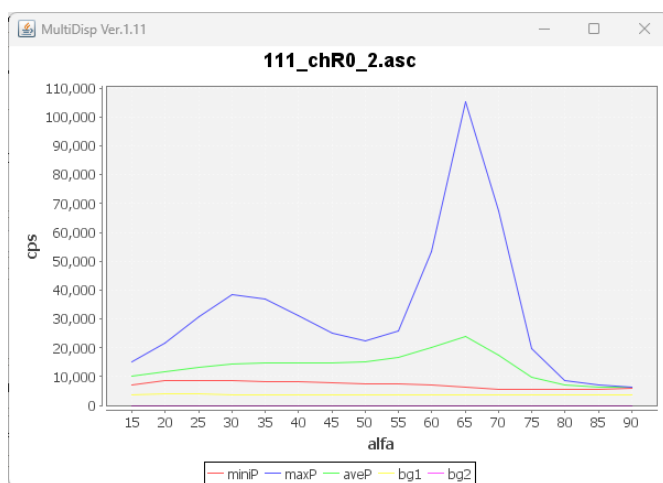
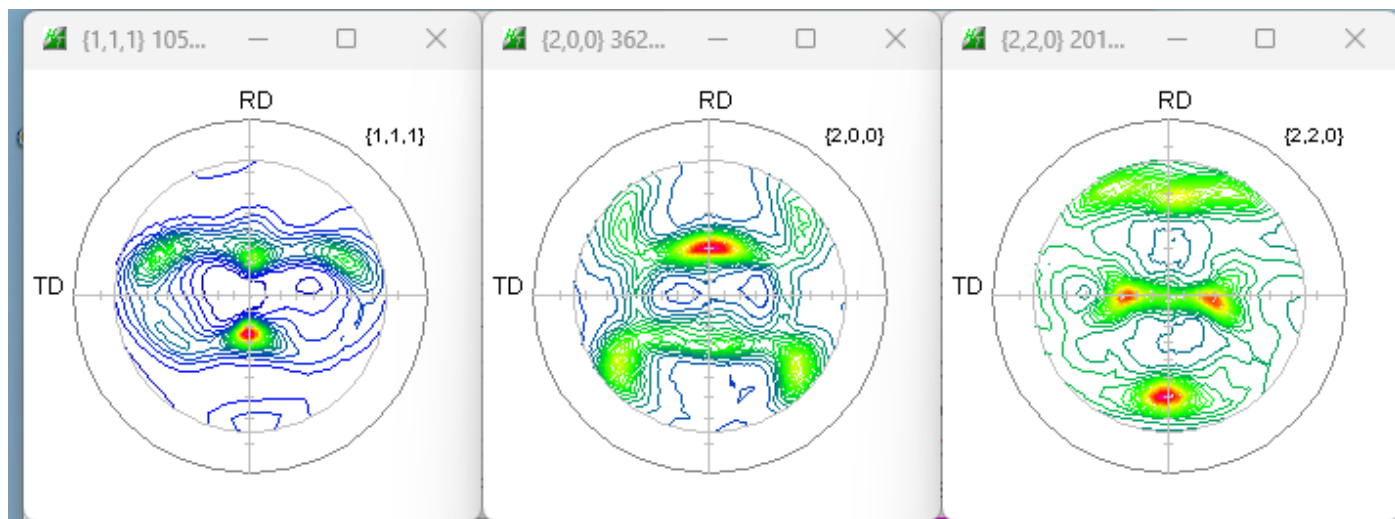
random = 99% (実測定データでは致しない事もあります)

randomlprofileで表示する (GPODFDisplayの機能)



random = 99%

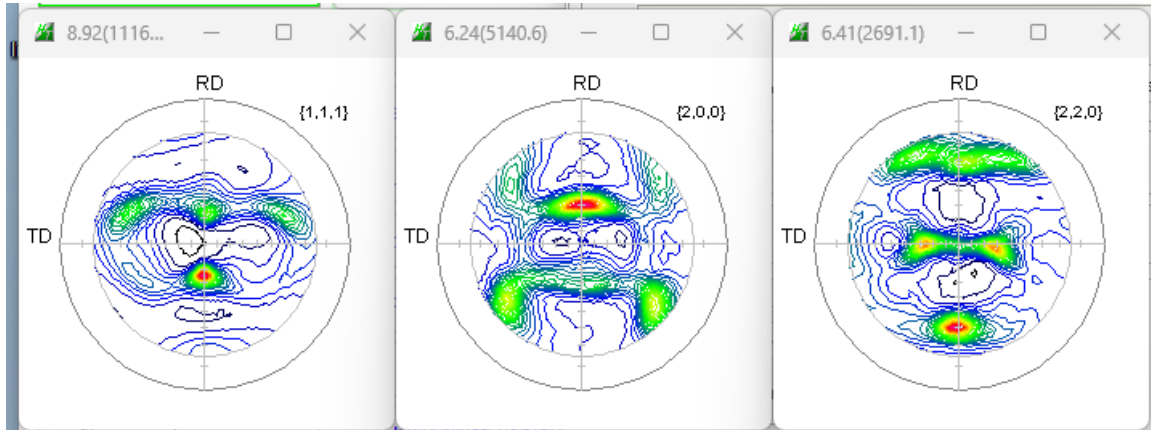
2. 測定データ



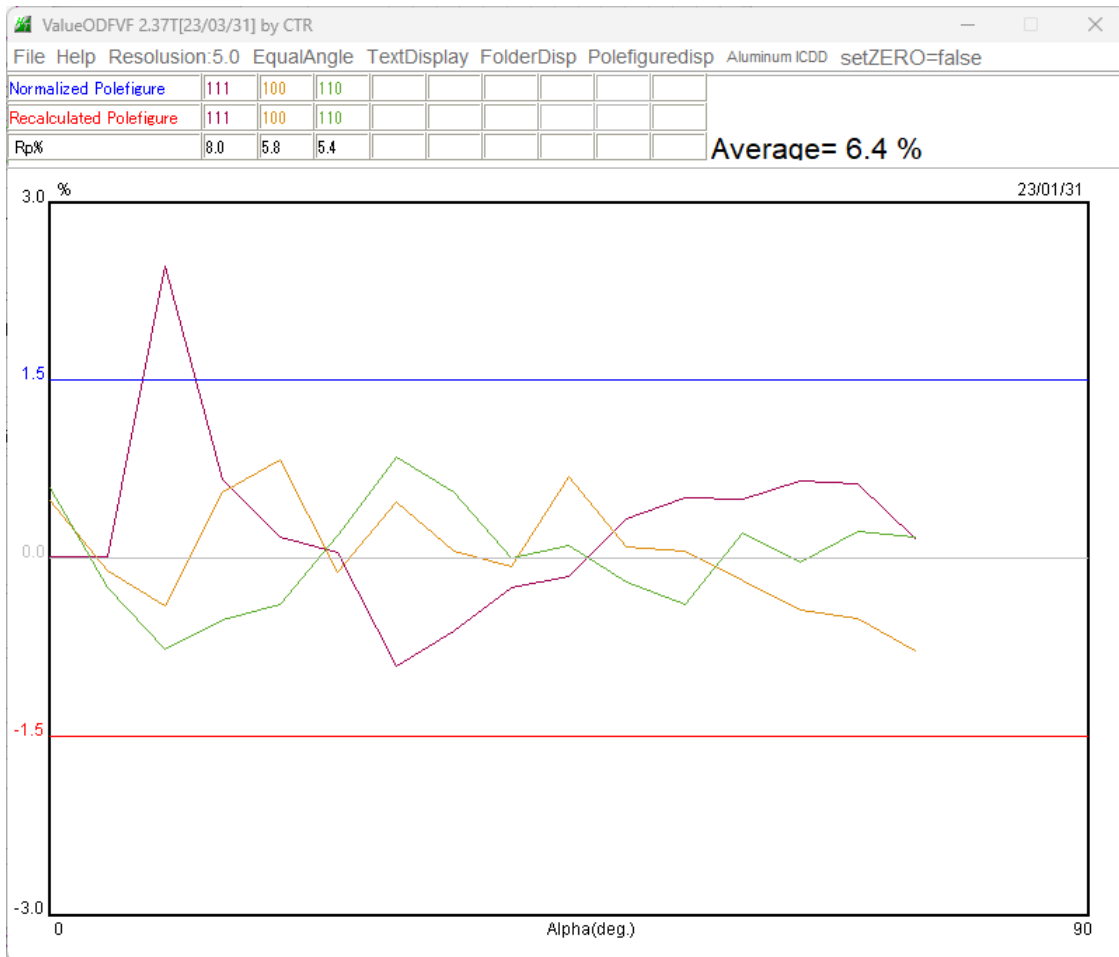
黄色表示がバックグラウンドです。

3. 極点処理

バックグラウンド除去、計算 r a n d o m補正、内部規格化



予測 Rp%

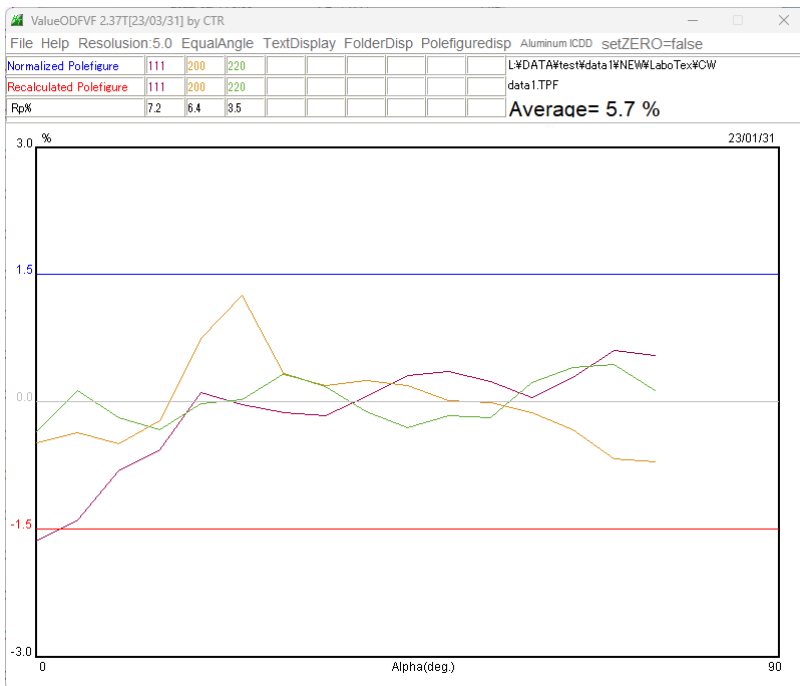
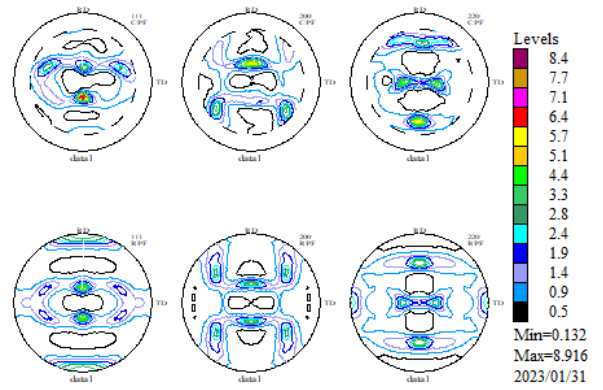
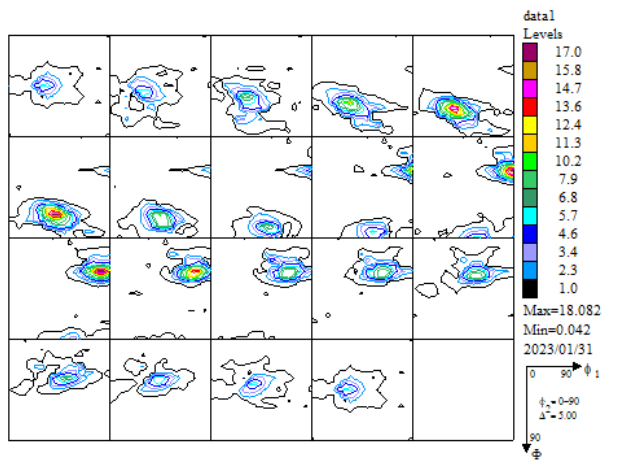


計算結果

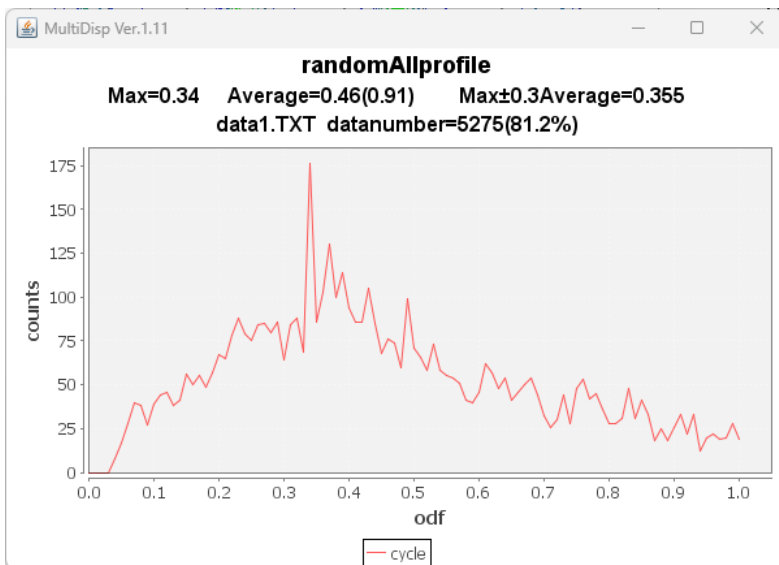
{ 1 1 1 } 極点図、中心から 1 0 d e g の密度が高い傾向がある。

4. ODF解析にて random%を求める

4.1 LaboTex

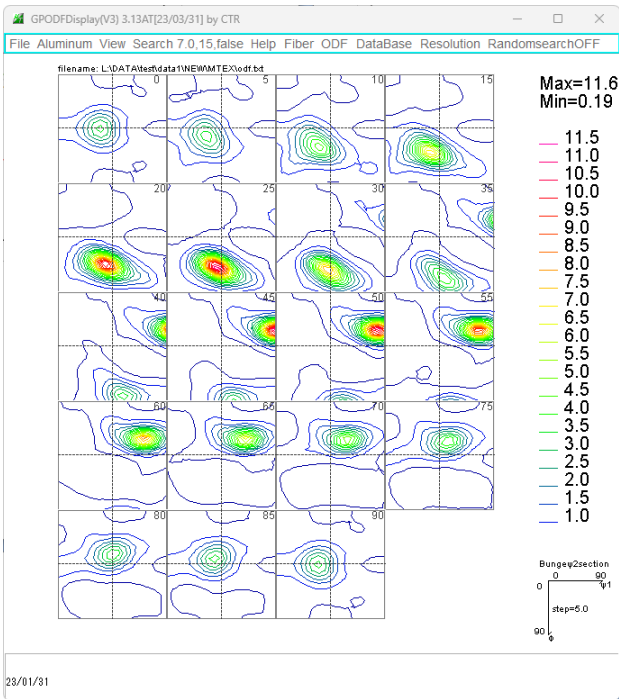


ほぼ計算されている。

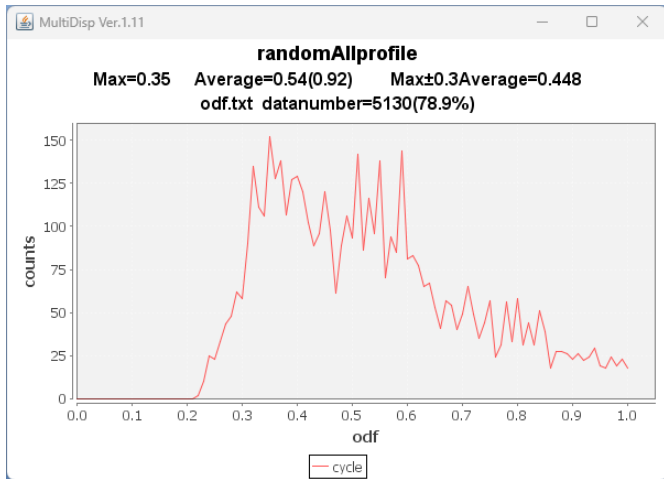


34%の randomが含まれている。

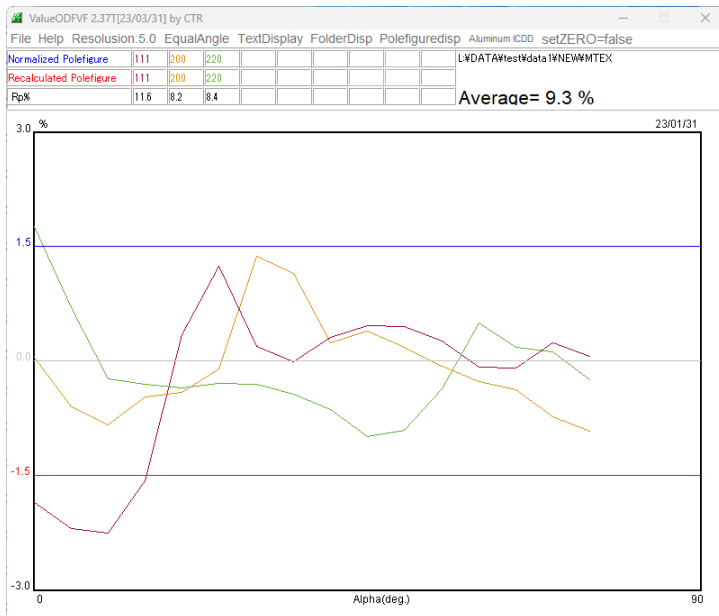
4. 2 MTEX



半幅幅 10 deg で計算されている



3.6%の randomが含まれている。



4. 3 WIMV

ODF計算 ? 4

ODFを計算 ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: WIMVモデル

試料の対称性: 1/4対称

α解析開始角度(°): 0.00

α解析終了角度(°): 90.00

ODFグリッド

φ₁ステップ(°): 5.00

φステップ(°): 5.00

φ₂ステップ(°): 5.00

パラメータ

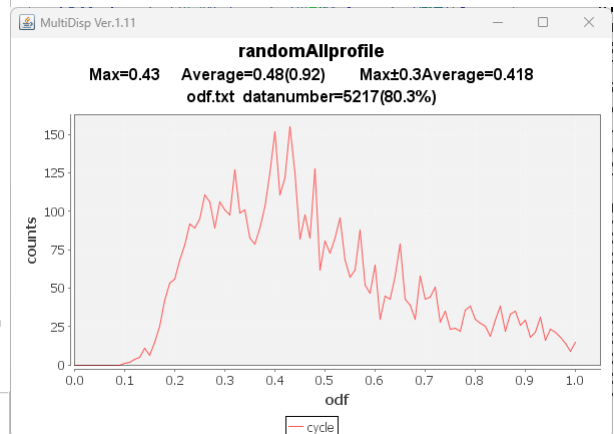
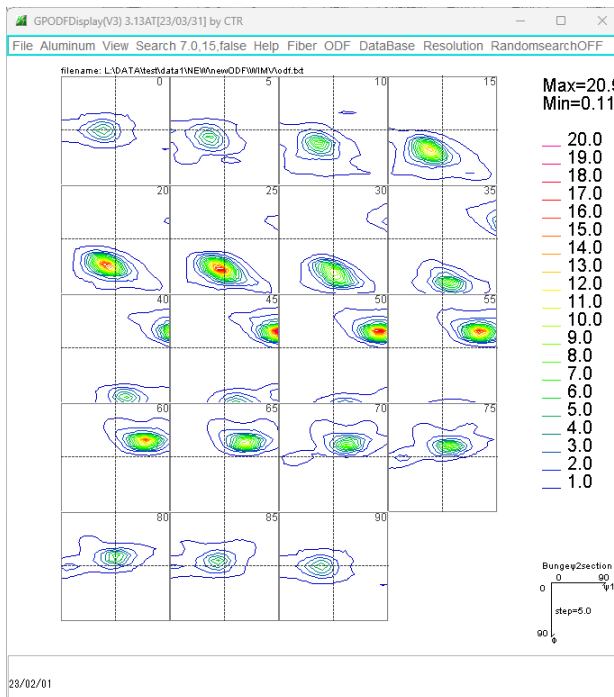
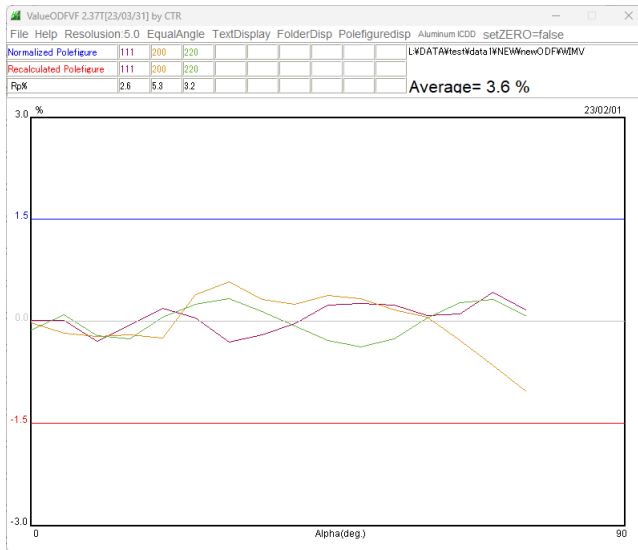
結晶相: Al

最大繰り返し数: 10

ε = 0.0100

バックグラウンドをフィッティング:

RP因子=19.95 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算



random%が43%と少し多めに計算される。

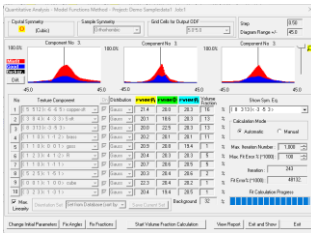
5. Volume Fractionを求める

5.1 LaboTex

含まれている可能性の高い順に表示されます。

LaboTex - Texture - Quantitative Analysis Report
 User: TEST
 Project: Demo
 Sample: data1
 Job: 3
 Date:2023/02/01
 Time:10:43:54

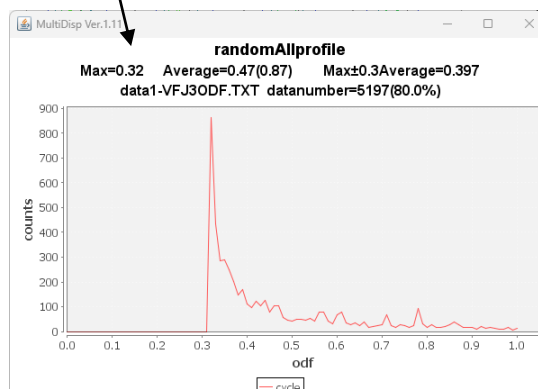
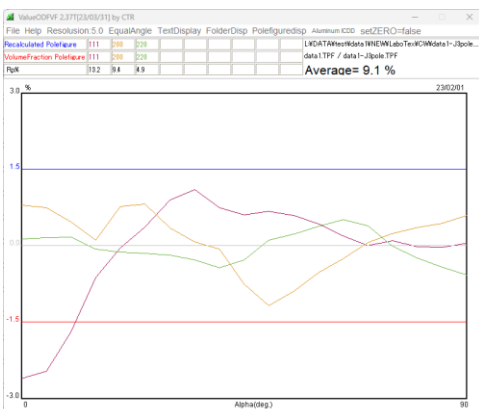
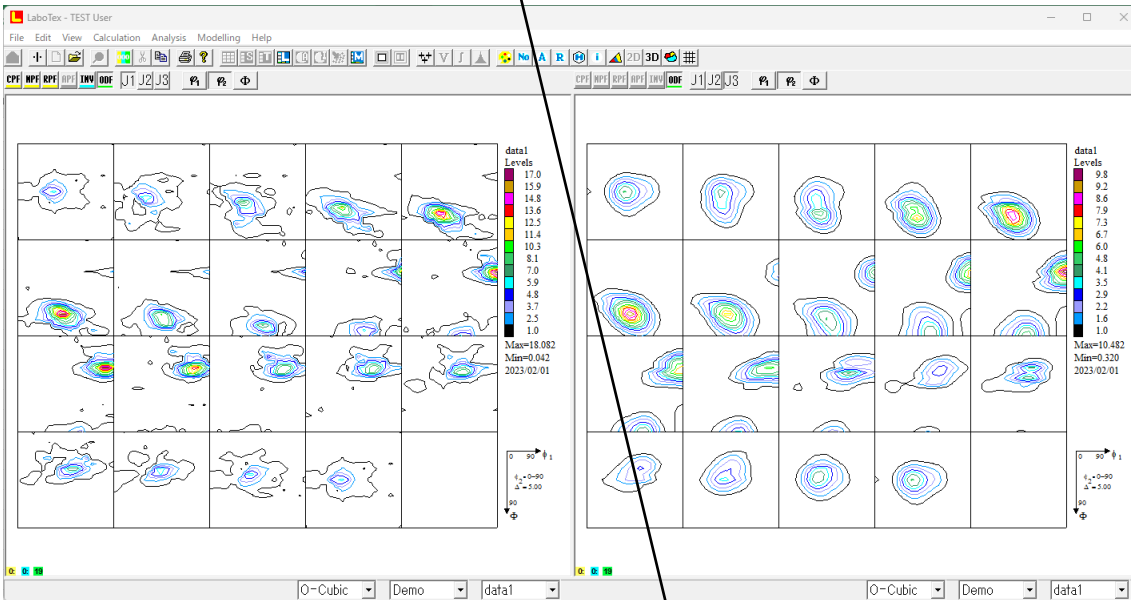
Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1	-	Distribution :Gauss		
15.98	21.4	20.0	20.3	[5 5 12]< -6 -6 5 > copper-sft
Component No 2	-	Distribution :Gauss		
13.43	20.1	18.6	20.3	[3 8 4]< 4 -3 3 > S-sft
Component No 3	-	Distribution :Gauss		
12.72	20.0	22.5	20.3	[8 3 13]< -3 -5 3 >
Component No 4	-	Distribution :Gauss		
10.69	20.2	20.1	20.1	[1 1 0]< 1 -1 2 > brass
Component No 5	-	Distribution :Gauss		
1.24	20.9	20.8	19.4	[1 1 0]< 0 0 1 > goss
Component No 6	-	Distribution :Gauss		
5.28	20.4	20.3	20.3	[1 2 3]< 4 1 -2 > R
Component No 7	-	Distribution :Gauss		
4.64	20.7	20.6	20.5	[1 1 0]< 1 -1 1 >
Component No 8	-	Distribution :Gauss		
2.44	20.3	20.4	20.6	[5 2 5]< 1 -5 1 >
Component No 9	-	Distribution :Gauss		
1.17	22.3	20.4	20.2	[0 0 1]< 1 0 0 > cube
Component No 10	-	Distribution :Gauss		
0.60	20.4	19.4	20.5	[3 2 3]< 1 -3 1 >
31.82	Background Volume Fraction			



予測 random%34% ← に対し 31.82% が求まる

入力極点図から計算した ODF

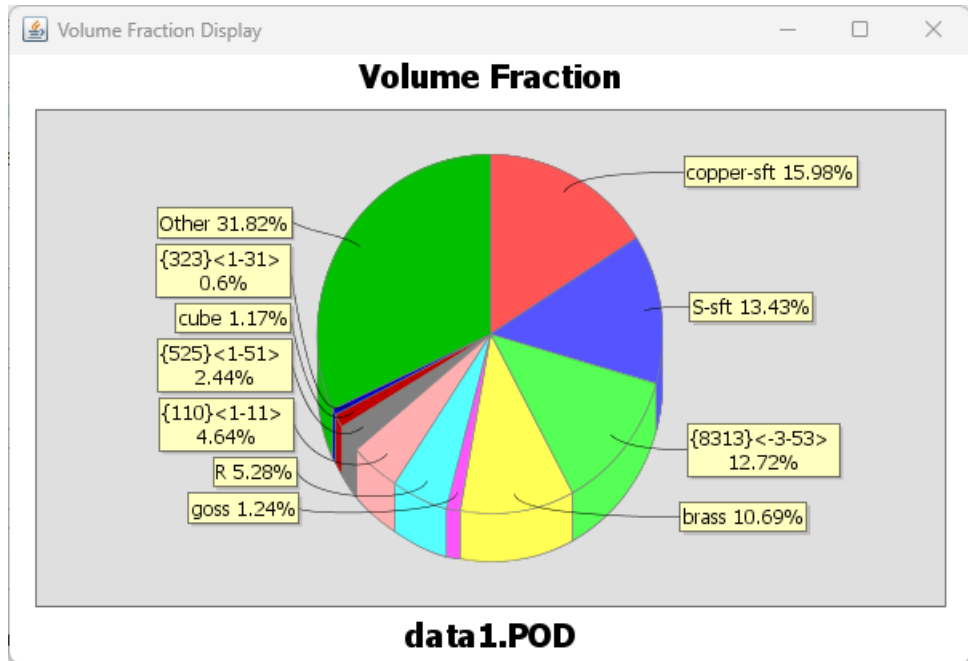
VF%から計算した ODF



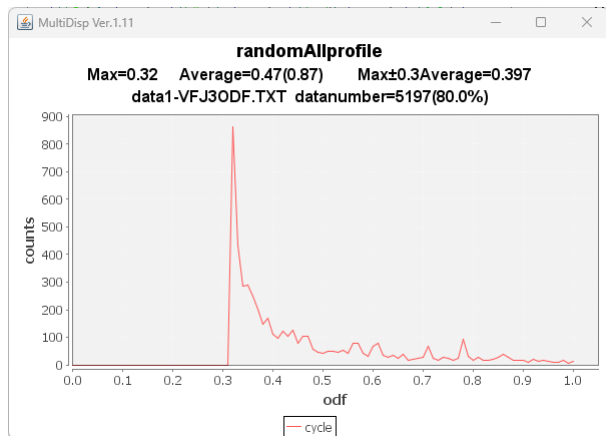
5. 1. 1 Volume Fraction評価

Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1 15.98	- Distribution :Gauss 21.4	20.0	20.3	{ 5 5 12 } < -6 -6 5 > copper-sft
Component No 2 13.43	- Distribution :Gauss 20.1	18.6	20.3	{ 3 8 4 } < 4 -3 3 > S-sft
Component No 3 12.72	- Distribution :Gauss 20.0	22.5	20.3	{ 8 3 13 } < -3 -5 3 >
Component No 4 10.69	- Distribution :Gauss 20.2	20.1	20.1	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass
Component No 5 1.24	- Distribution :Gauss 20.9	20.8	19.4	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
Component No 6 5.28	- Distribution :Gauss 20.4	20.3	20.3	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R
Component No 7 4.64	- Distribution :Gauss 20.7	20.6	20.5	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >
Component No 8 2.44	- Distribution :Gauss 20.3	20.4	20.6	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >
Component No 9 1.17	- Distribution :Gauss 22.3	20.4	20.2	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
Component No 10 0.60	- Distribution :Gauss 20.4	19.4	20.5	{ 3 2 3 } < 1 -3 1 >
31.82	Background Volume Fraction			

予め調べた r a n d o m % 3 4 % を下回った時点で計算終了とした。



O t h e r が r a n d o m % + そ の 他 の 方 位 で あ る



V F % から計算した O D F の r a n d o m も 3 2 % を示している。
V F % 解析は終了していると判断出来ます。

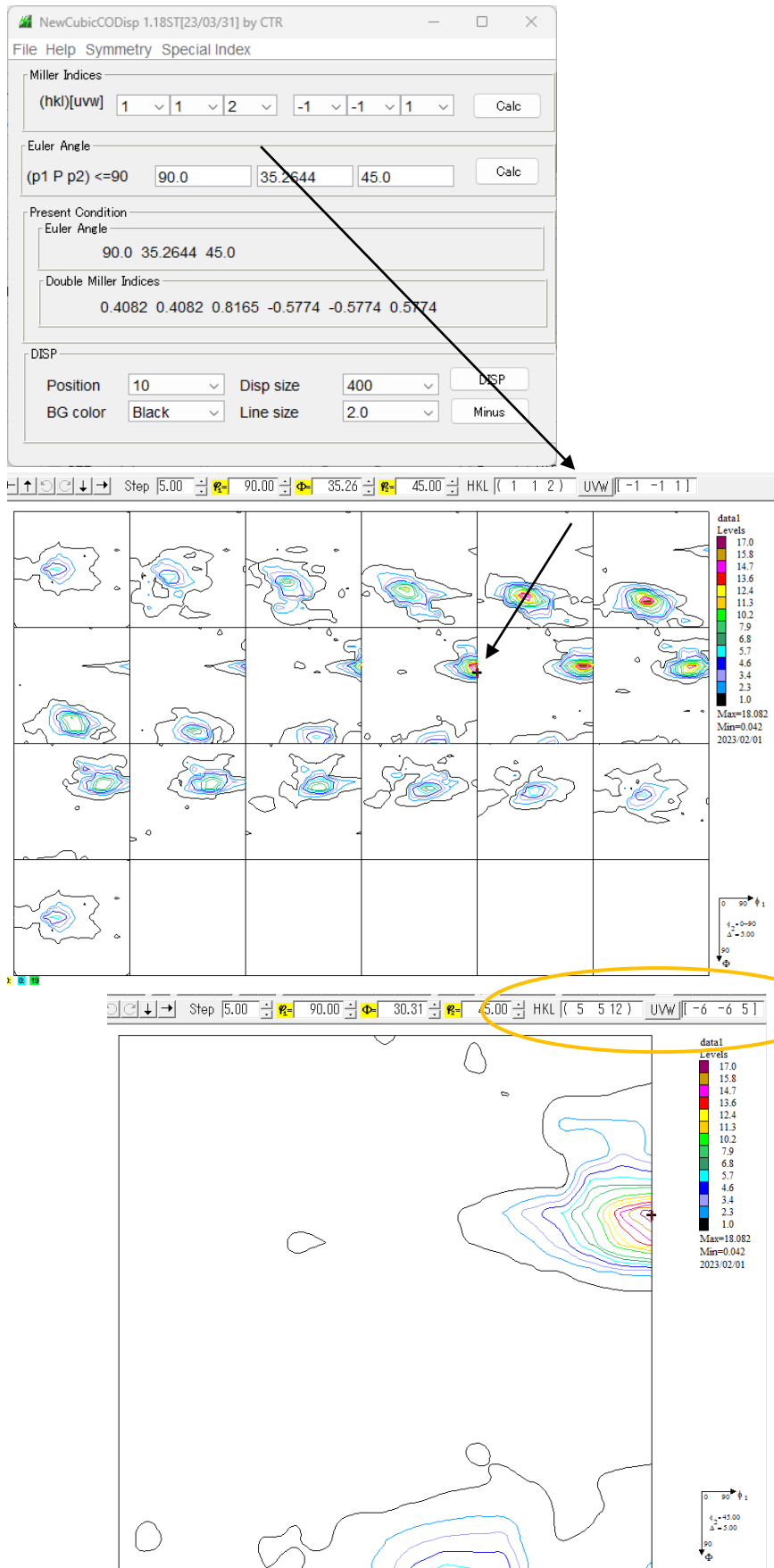
6. LaboTexのVolumeFractionを求める注意点

LaboTexの方位DataBaseには複数の方位が登録されている。

実際のODFに合わせる場合、Copper,やS方位はシフトしている可能性があります。

予めシフトを確認し DataBaseに登録しておきます。

Copper方位



S 方位

NewCubicCODisp 1.18ST[23/03/31] by CTR

File Help Symmetry Special Index

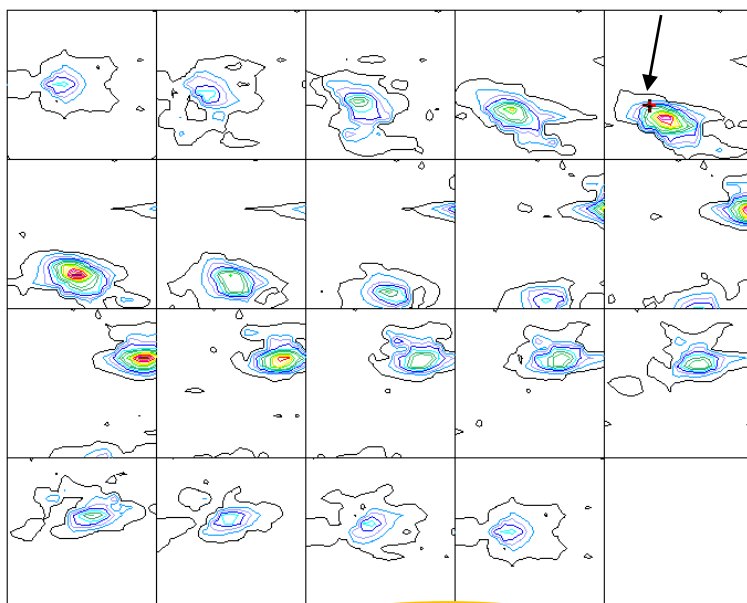
Miller Indices
(hkl)[uvw] 1 3 2 6 -4 3 Calc

Euler Angle
(p1 P p2) <=90 27.0319 57.6885 18.4349 Calc

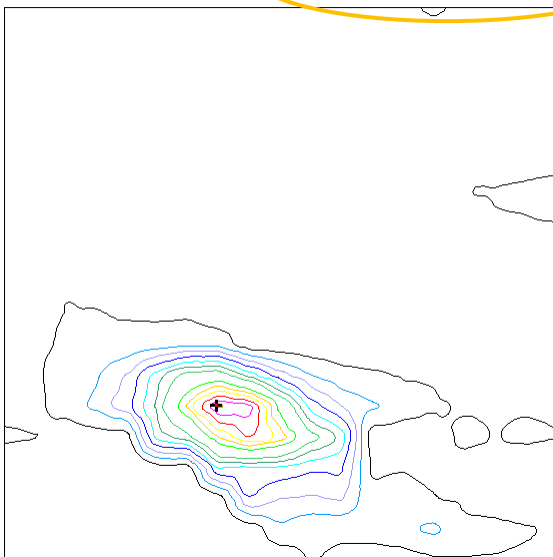
Present Condition
Euler Angle
27.0319 57.6885 18.4349
Double Miller Indices
0.2673 0.8018 0.5345 0.7682 -0.5121 0.3841

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

Step 5.00 Φ - 27.03 Ψ - 57.69 Θ - 18.43 HKL (1 3 2) UVW (6 -4 3)



34.62 Φ - 64.91 Ψ - 20.56 HKL (3 8 4) UVW (4 -3 3)



まとめ

r a n d o mが含まれている場合、B a c k g r o u n d (O t h e r) に定量されたV F %以外に指定されていない方位と r a n d o m %が含まれる。V F %の残渣が r a n d o m %を目標に解析が行われる。r a n d o mが含まれていない場合、残渣は0が目標になる。

残渣が有る場合、すなわち、指定方位が少ない場合、解析された%は多めに計算される傾向があります。

n e w O D Fでは、コンポーネント推定で方位の追加が可能かもしれません。

L a b o T e xのようなD a t a B a s eから可能性のある方位順指定が出来れば操作性が上がります。手持ちバージョンでは難しい。