

配向度関数評価プログラム

O r i e n t a t i o n ソフトウェア

Ver1.76

本ソフトウェアはODF (L a b o T e x, T e x T o o l s、M T E X) で再計算した完全極点図から配向度関数を計算する。立方晶以外の材料に対して可能
従来、透過極点測定と反射極点測定からデータのつなぎを行って完全極点図を作成し、配向度関数を計算していたが、反射法データのみ、透過法データのみで計算が可能になる。

(ODF 解析後、あるいはN D O r i e n t a t i o n などの外挿により)

この解析で重要なのは、 α 方向の分布密度から計算するので、

反射法はD e f o c u s 補正、透過法は吸収補正である。

配向度関数は古くからC u b i c 以外の底面配向評価として利用されている。

本ソフトウェアでは計算方法の改良が行われています。

2022月12月29日

HelperTex Office

操作上、不都合がありましたら helpertex@yahoo.co.jp へ連絡下さい。修正版は mail で送付致します。

- * Ver1.706 2010/09/12 MultiDisplay 機能による印刷を追加
- * Version 1.707 印刷用に Orientation: ND RD TD とした。バックグラウンド処理を外す。
- * Version 1.708 2011/02/05 NDOrientation より TXT2 で起動、
- * Version 1.709 2011/02/11 TXT2filename ファイルが 1 行の場合、データファイルとする。
- * Version 1.710 2011/03/09 fa,fb,fc -> f-nd,f-rd,f-td に変更
- *Version 1.75 2016/10/10 KermsMethod 追加
- 2022/12/29 LaboTex<>Orientation、MTEX<>Orientation 比較追加
- * Version 1.76 2022/12/30 T X T 2 の不完全極点図を入力出来ないように

概要

立方晶を除く結晶系の材料でODF解析が対応出来なかった頃に発達した結晶方位の評価方法
{001}のND, TD, RDへの偏りを算出する。完全極点図に対応
極点図の中心を0.0度、極点図の外側を90.0とした場合

$$f_{nd} = n_d / T$$

$$f_{rd} = r_d / T$$

$$f_{td} = t_d / T$$

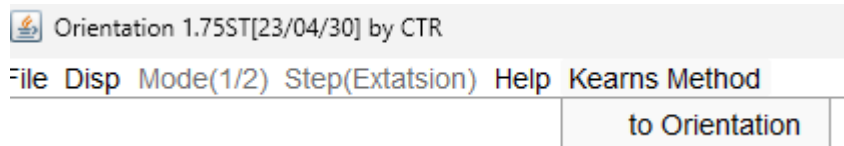
$$\text{ただし } T = \sum \sum I_c(\alpha, \beta) * \sin(\Delta \alpha)$$

$$n_d = \sum \sum I_c(\alpha, \beta) * \cos^2(\alpha) * \sin(\Delta \alpha)$$

$$r_d = \sum \sum I_c(\alpha, \beta) * \sin^2(\alpha) * \sin(\Delta \alpha) * \cos^2(\beta)$$

$$t_d = \sum \sum I_c(\alpha, \beta) * \sin^2(\alpha) * \sin(\Delta \alpha) * \sin^2(\beta)$$

$\sin(\Delta \alpha)$ は



により計算モードを変更する

Keams Method

$$\sin(\alpha + \text{step} / 2) - \sin(\alpha - \text{step} / 2)$$

$$(\alpha + \text{step} / 2) > 90 \rightarrow 1$$

$$(\alpha - \text{step} / 2) < 0 \rightarrow 0$$

Orientation

$$\alpha \text{ が } 0 \text{ 又は } 90 \text{ 度で } 1 / 2 \sin(\alpha)$$

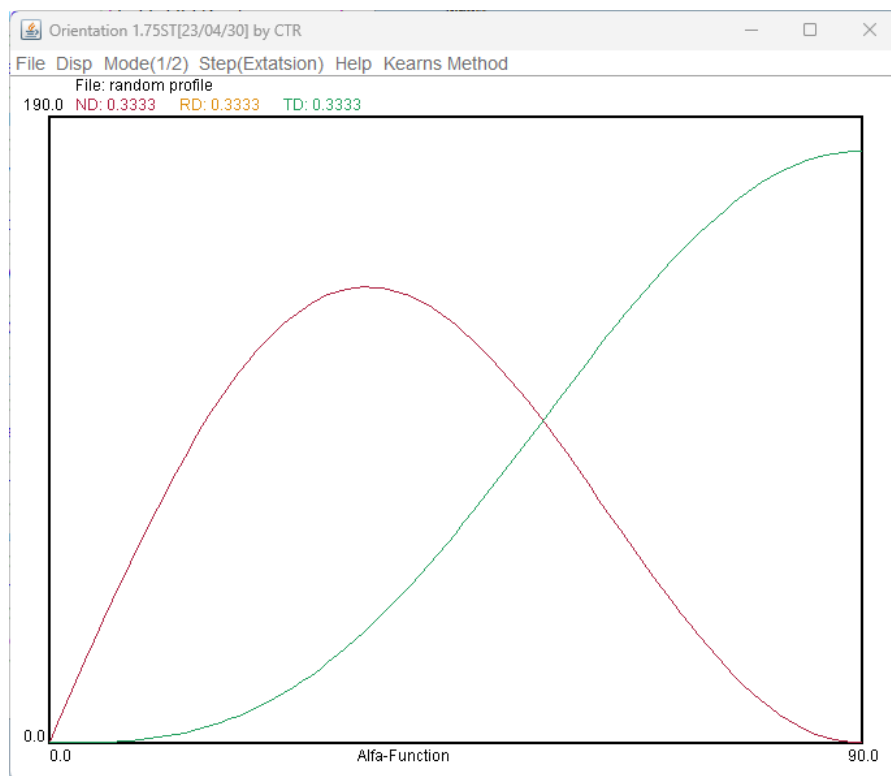
上記以外は $\sin(\alpha)$

測定 $\text{step} > 1$ の場合、データ補間を行う。

Kearns Methods で使用する。

Cubic では、ND, RD, TD は同一です。

アプリケーションの初期画面

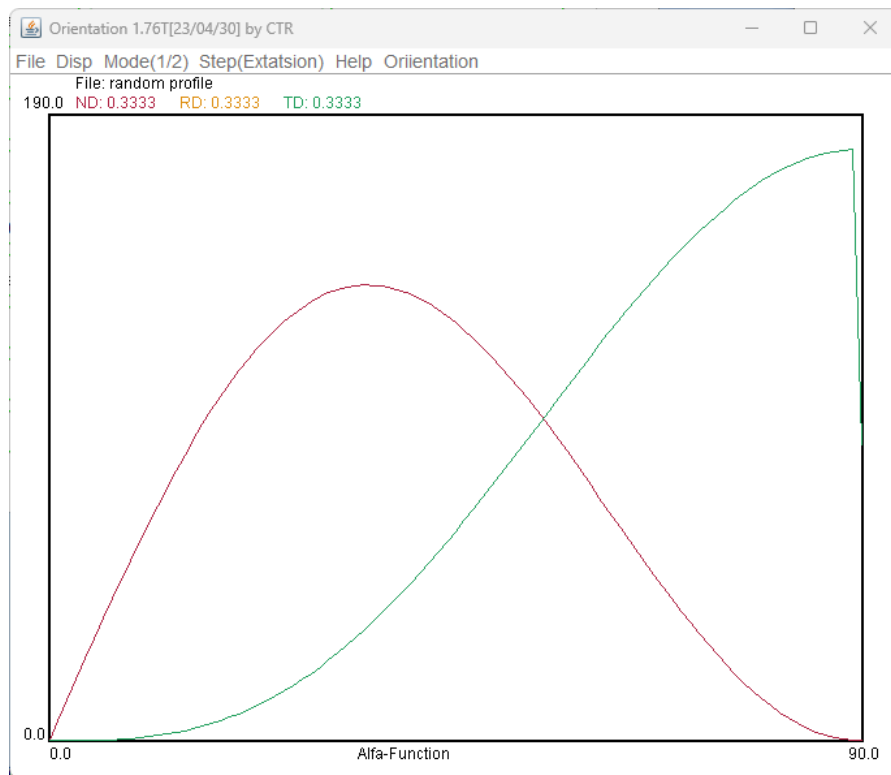


極点図のすべての (α , β) 強度を 1.0 とした場合の n_d , r_d , t_d を表示している。初期条件は、 α 、 β 共に 5.0 間隔で測定された測定間隔を 0.3125 度間隔に拡張し更に $\alpha = 0.0$ と 90.0 のデータは 1/2 評価としている。

本アプリケーションは、ODF 解析した結果の完全極点図から配向度関数を計算する。追加、ODFPoleFigure、NDOrientation で作成する TXT2 も対象とした。

ソフトウェアの起動

C:\CTR\bin\Orientation.jar

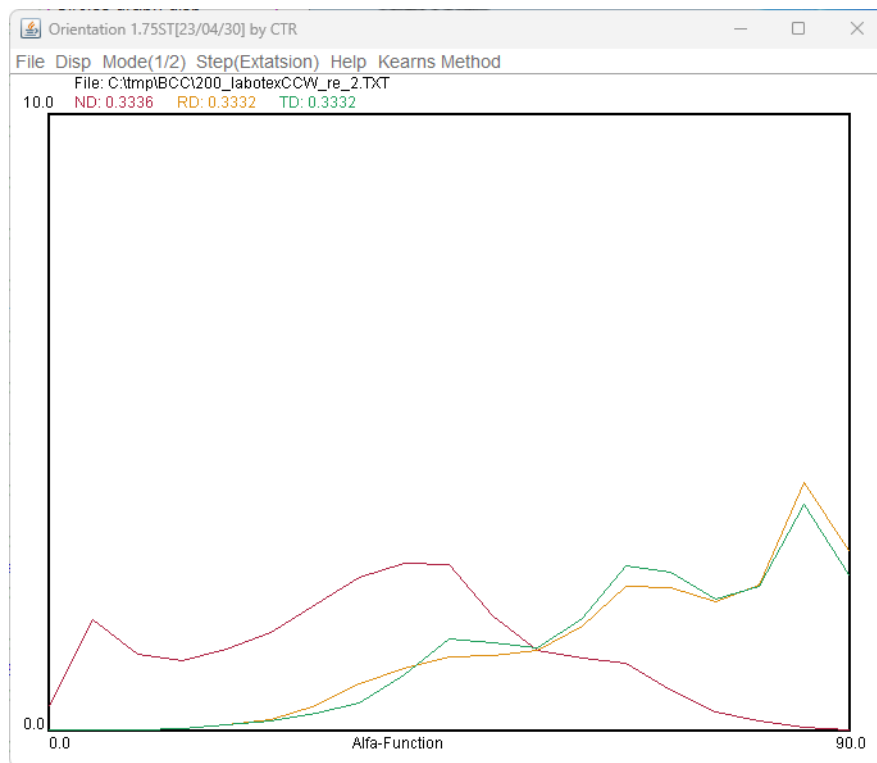
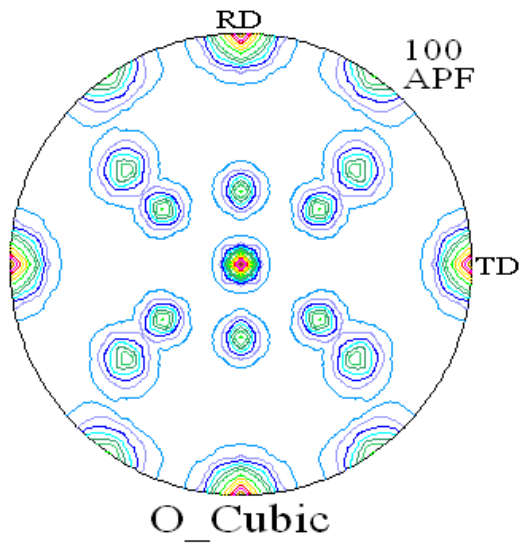


File から LaboTex、TexTools の Export ファイルを選択する。

Disp で f ($f_{nd}+f_{rd}+f_{td}=1$) と F ($F_a+F_b+F_c=-0$) の切り替え

Cubicでの動作

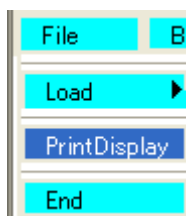
Cubicの極点図は対称の為、本来は全て0.333となる。 {100} 極点図で確認
brass, cube、copper方位を10%として作成した {100} 極点図



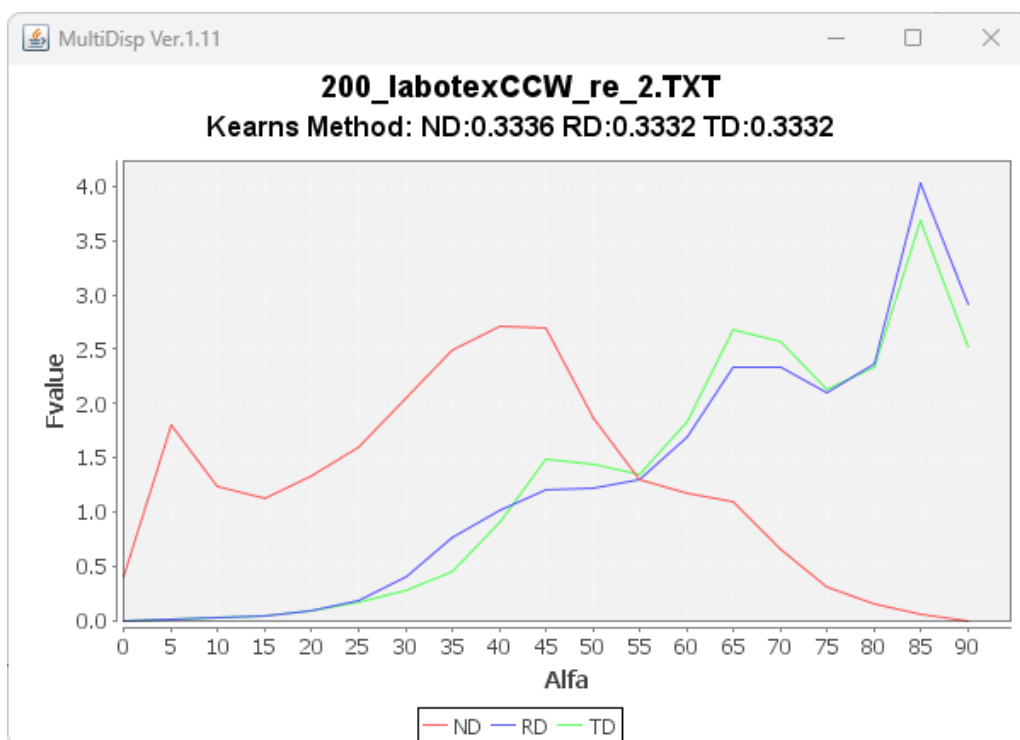
立方晶ではこのように全て0.333に近い値を示す。

印刷用 PrintDisplay を起動

Ver1.706 MultiDisplay 1.106 以降と組み合わせ

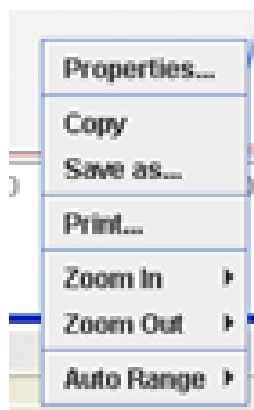


PrintDisplay から MultiDisplay

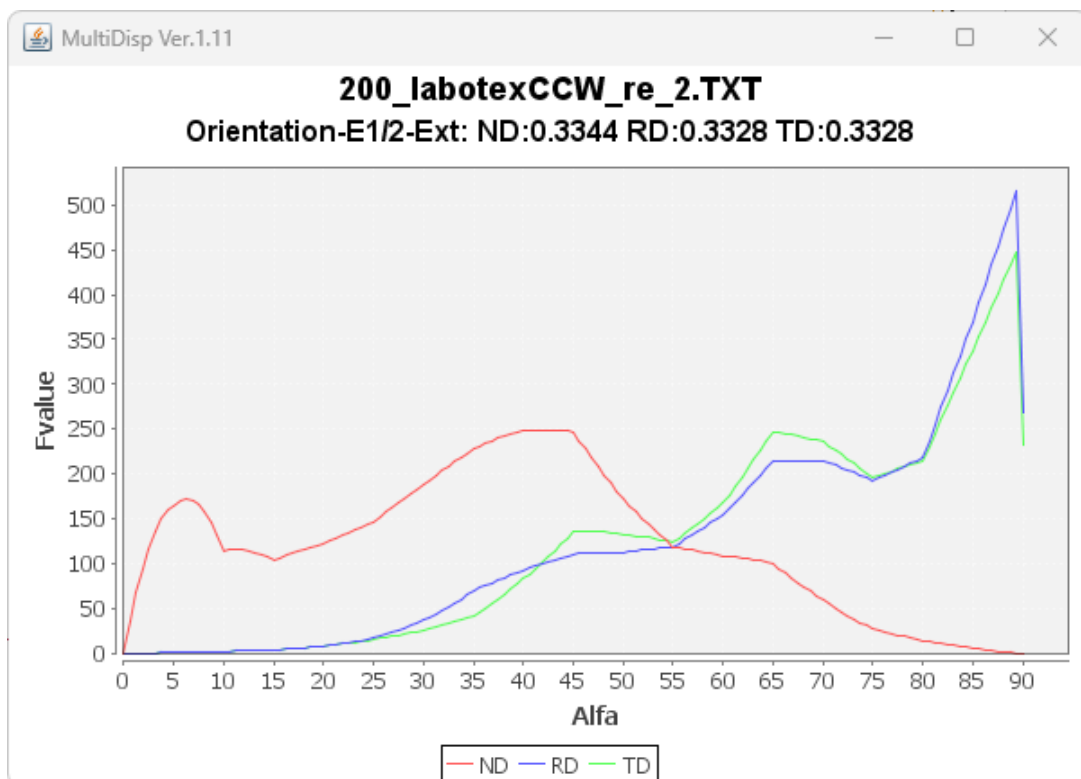
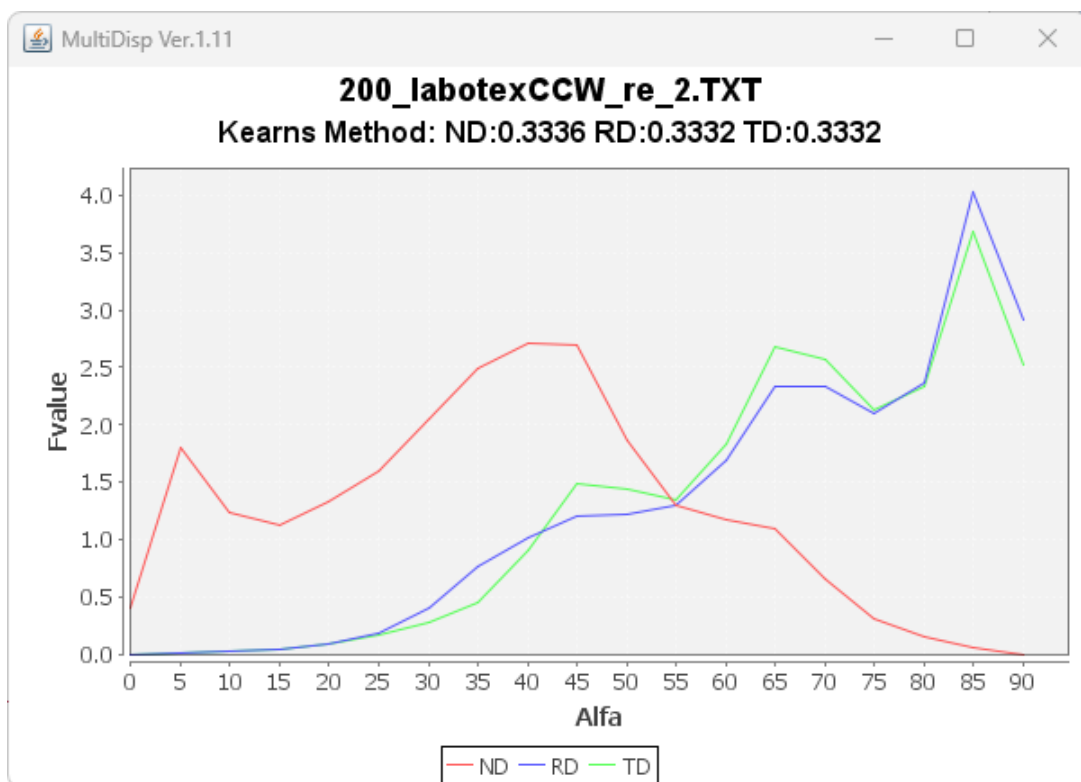


右マウスクリックで P r

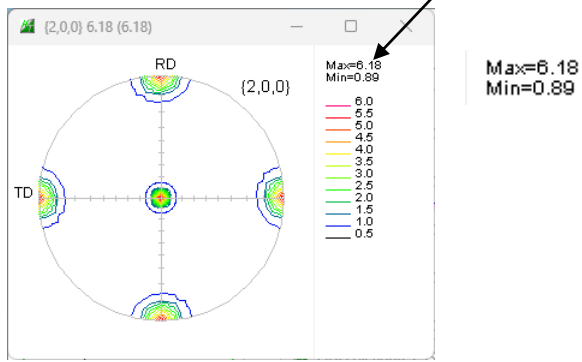
i n t が可能になります。



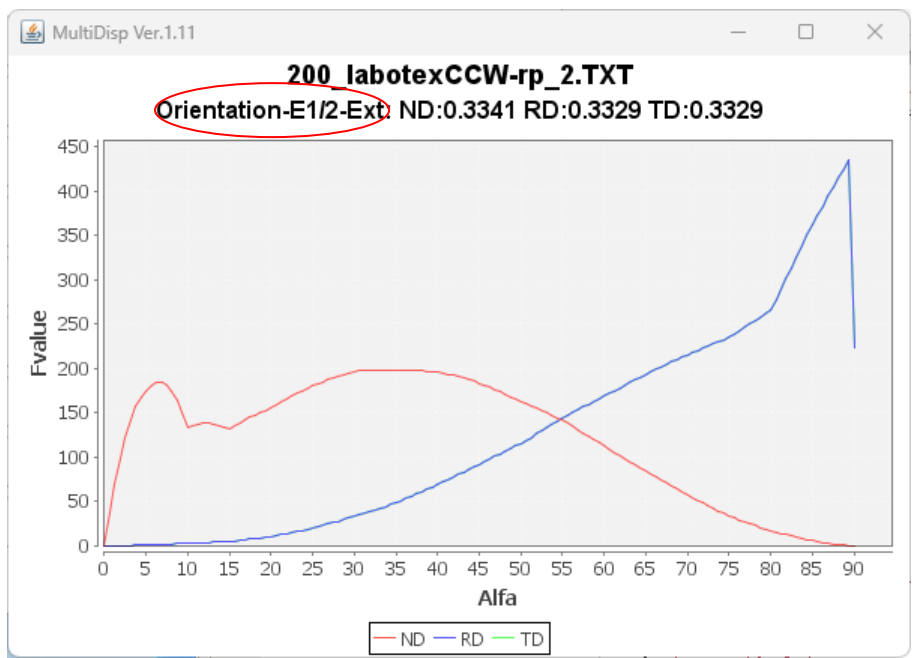
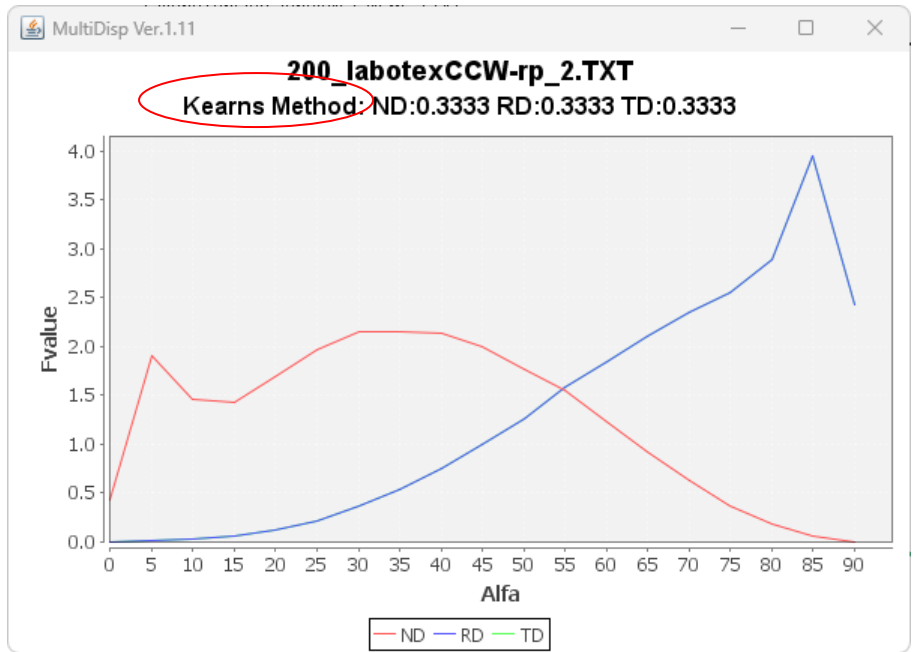
Kearns MethodとOrientationの違い



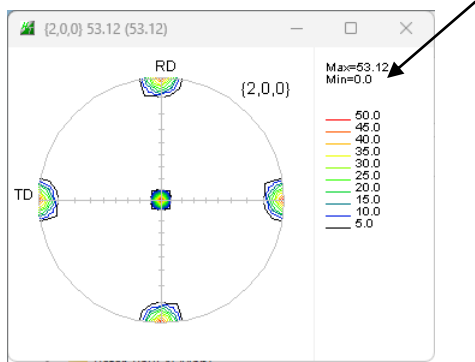
Cube 10%の場合 (random: 90%)



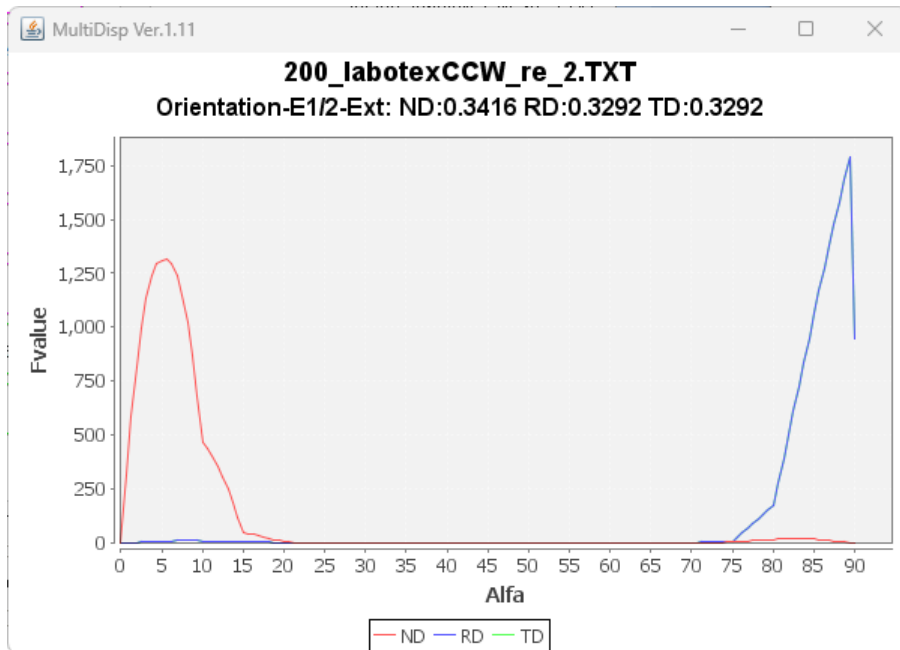
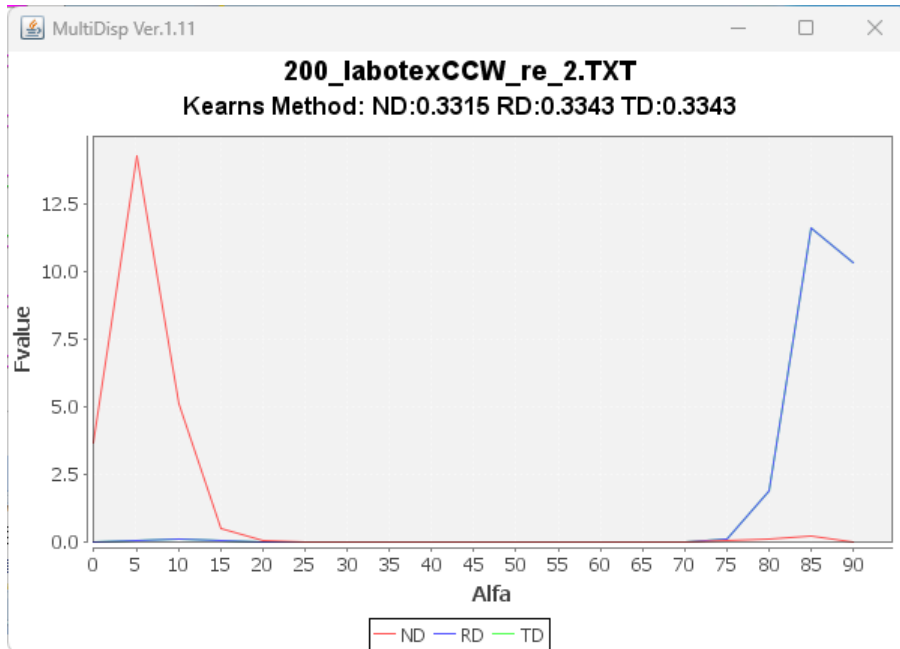
Kearns MethodとOrientationの違い



Cube 100%の場合 (random: 0%)



Kearns Method と Orientation の違い

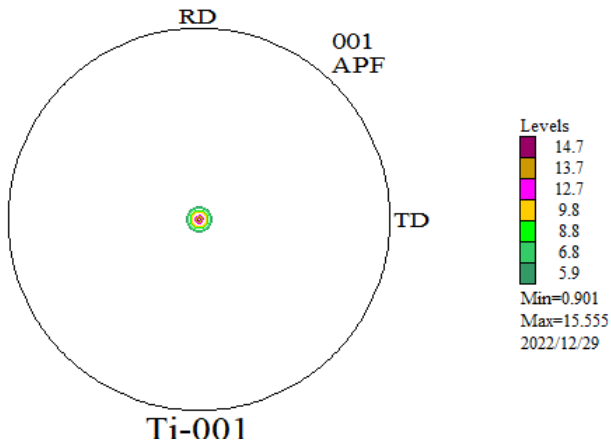


random レベルが下がると、差が出ます。

本来、Cubic では、ND, RD, TDm の変化はないので、Kearns Method が正しい

Titaniumで確認{001}<100> 10%

LaboTex



Calculation of Anisotropy Factors

Calculation for Hexagonal, Tetragonal and Orthorhombic Crystal Systems

Fraction of Basal Planes {001} in Sample Directions		
LD	TD	ND
0.3147	0.3147	0.3705
f1	f2	f3

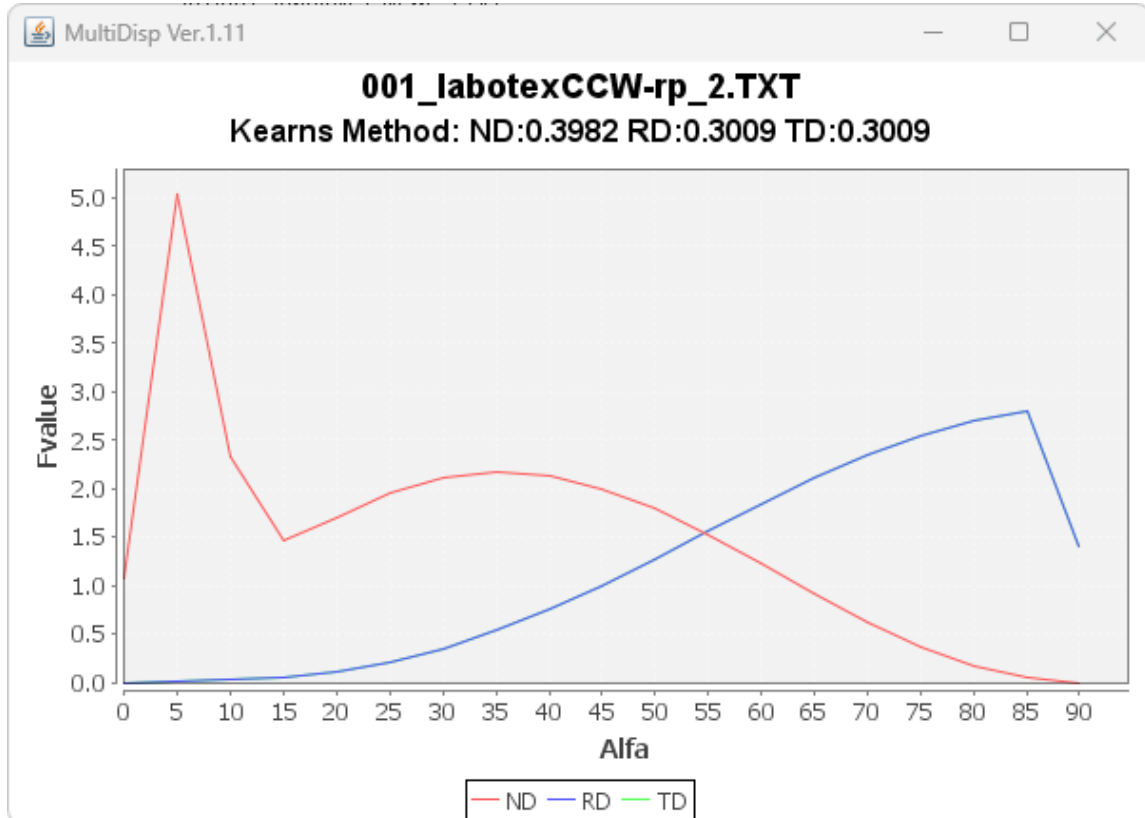
Angles between Basal Planes {001} and Sample Directions		
LD	TD	ND
56.7	56.7	50.9
a	b	c

Kearns Factors (Fraction in Physical Property)		
LD	TD	ND
0.3007	0.3007	0.3986
fL	fT	fN

Texture Index (F2) (normalized) 0.93395
('0' - Random, '1' - Monocrystal)

Calculate
End

CTR-Orientat ion



MTEXによるKearnsFactor

```
>> k=calcKearnsFactor(odf,zvector,h)
```

k =

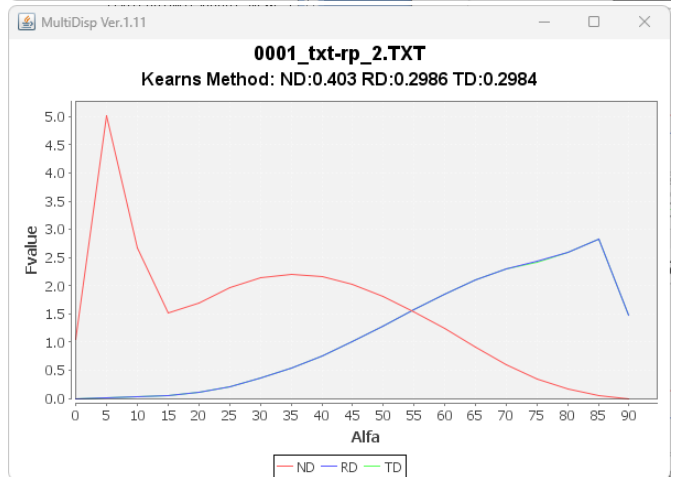
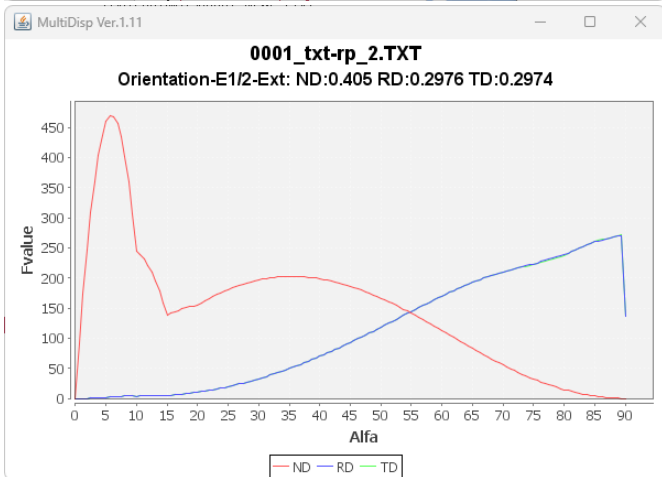
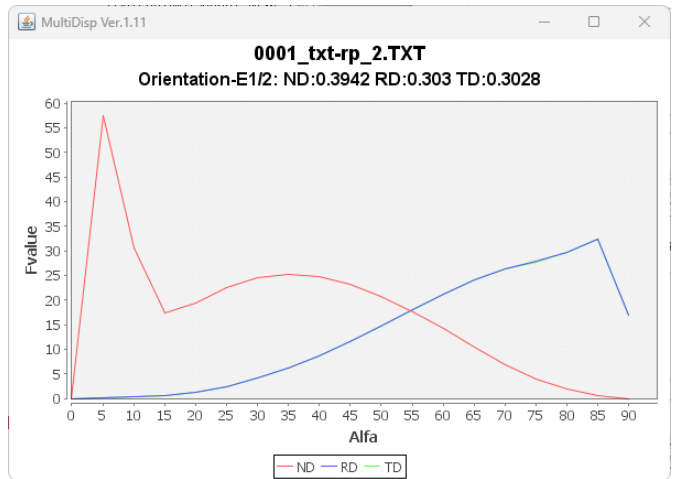
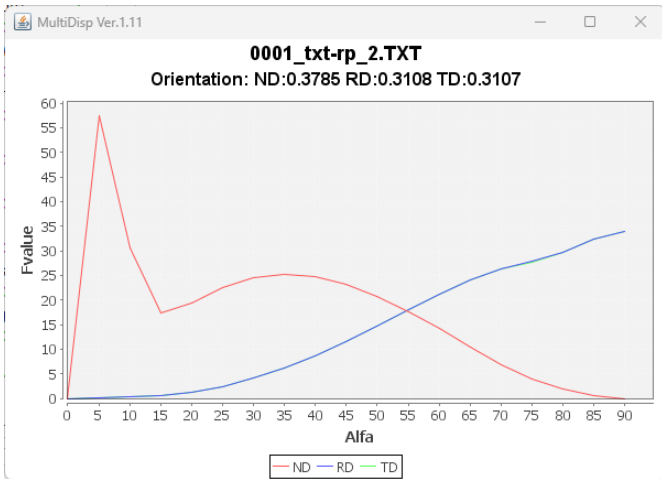
0.4005

```
>> k=calcKearnsFactor(odf,xvector,h)
```

k =

0.2999

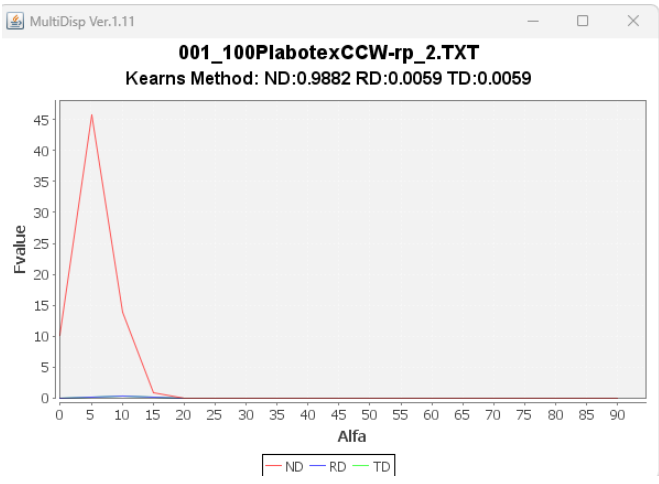
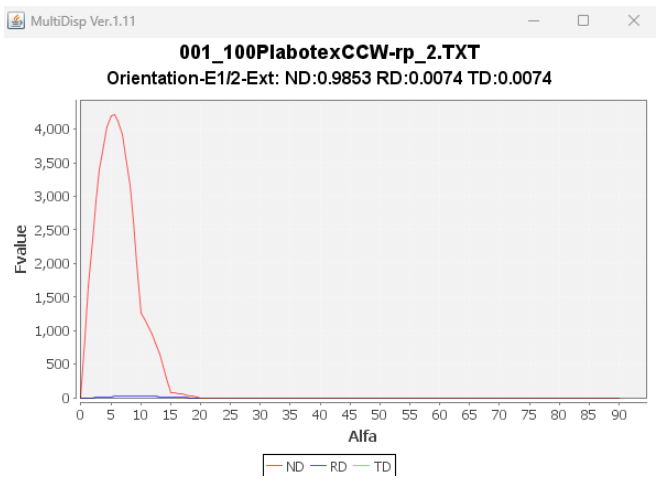
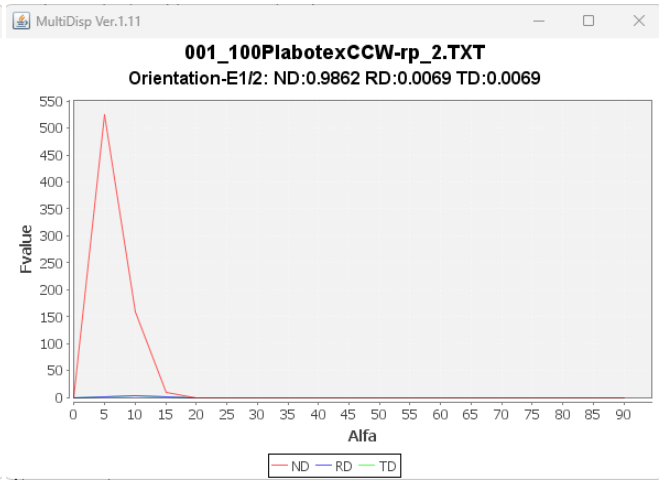
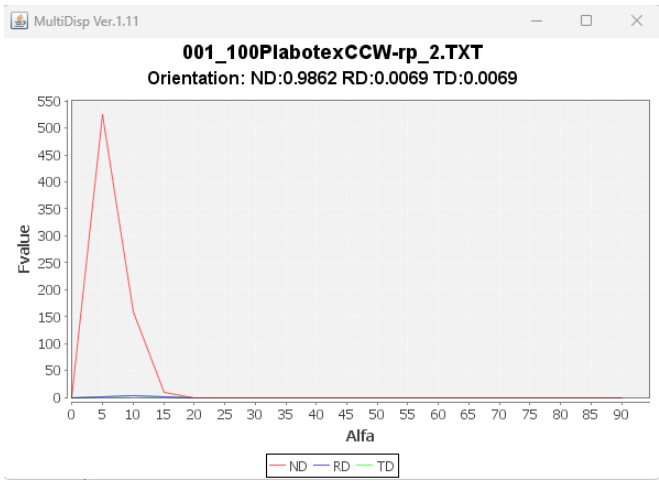
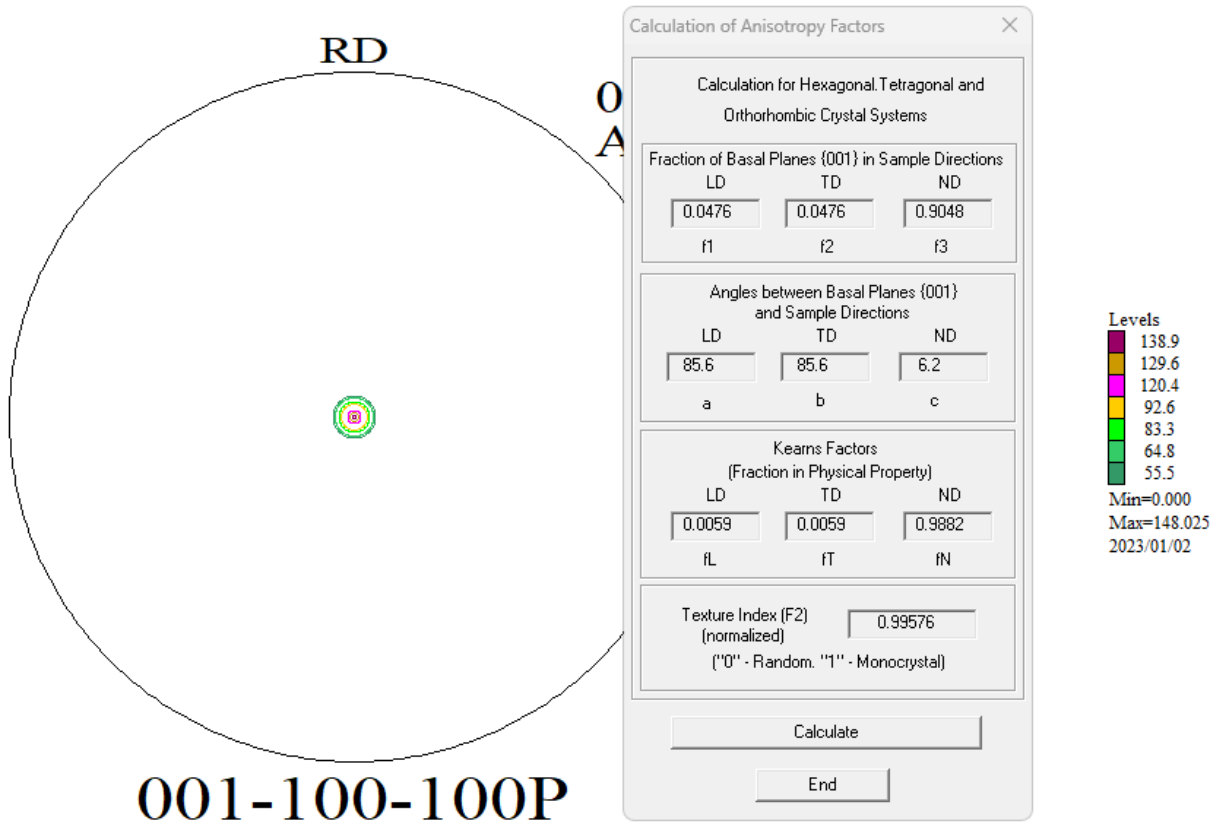
MTEXで計算した {0001} 極点図をOrientationによる各種評価



	ND	RD	TD
f	0.38915	0.30543	0.30543
F	0.08372	-0.04186	-0.04186

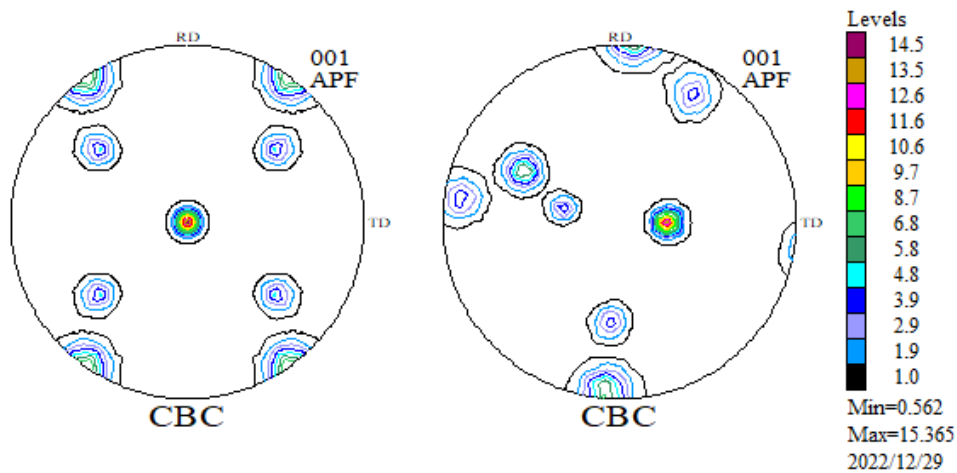
計算方法	終端処理	Step	ND	RD	TD
MTEX		1 step	0.4005	0.2999	
従来の方法		1 step	0.3785	0.3108	0.3107
終端処理	1/2	step	0.3942	0.303	0.3028
終端処理+データ補間	1/2	step<1.0	0.405	0.2976	0.2974
RINT2000	1/2	step	0.38915	0.30543	0.30543
KearnsMmethod		1 step	0.403	0.2986	0.2984

Ti - {001} <100> 100%の場合

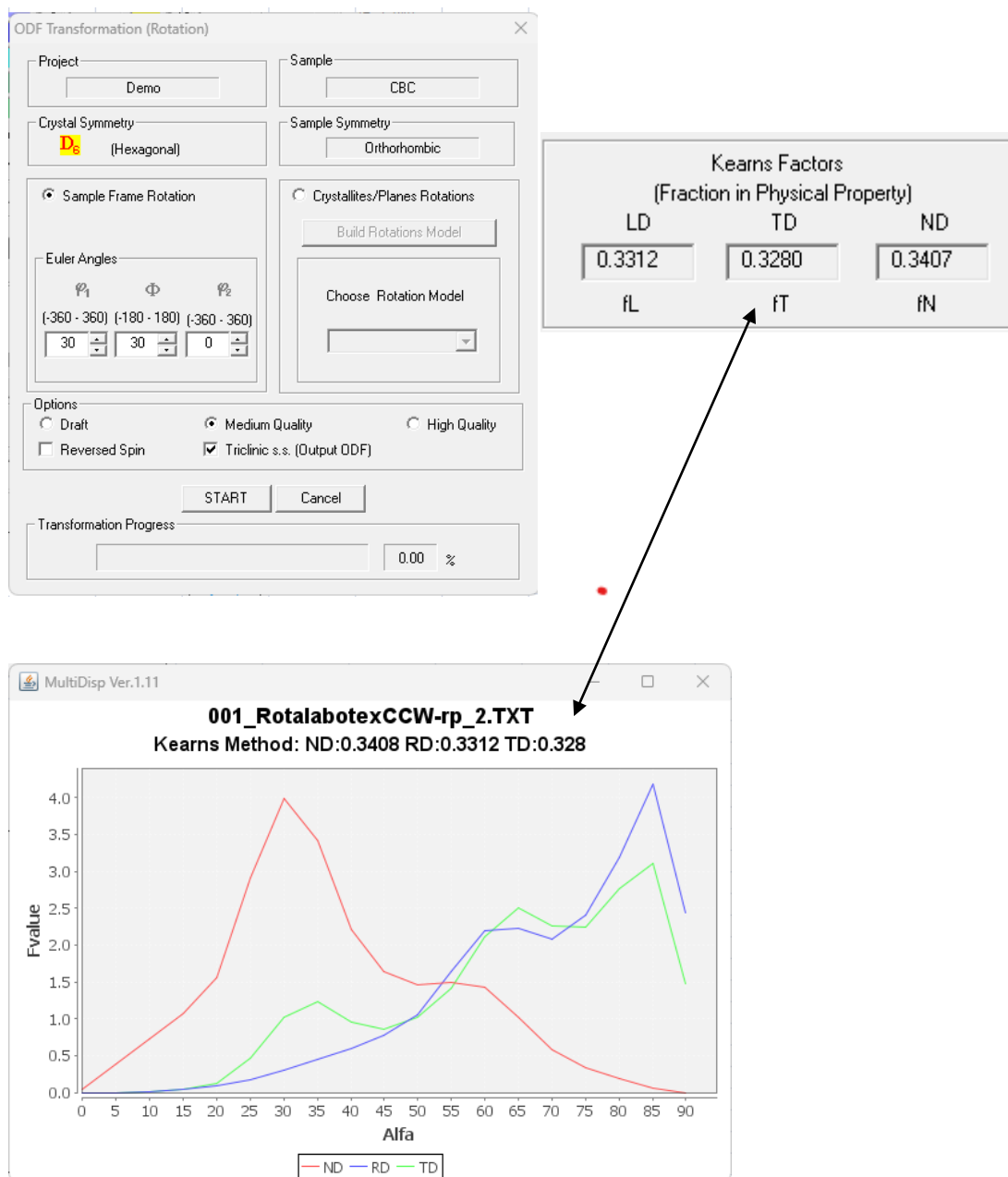


結晶性が良い場合、LaboTexとKearnsMethodは一致する。

対称T i 極点図に適用 (右極点図)

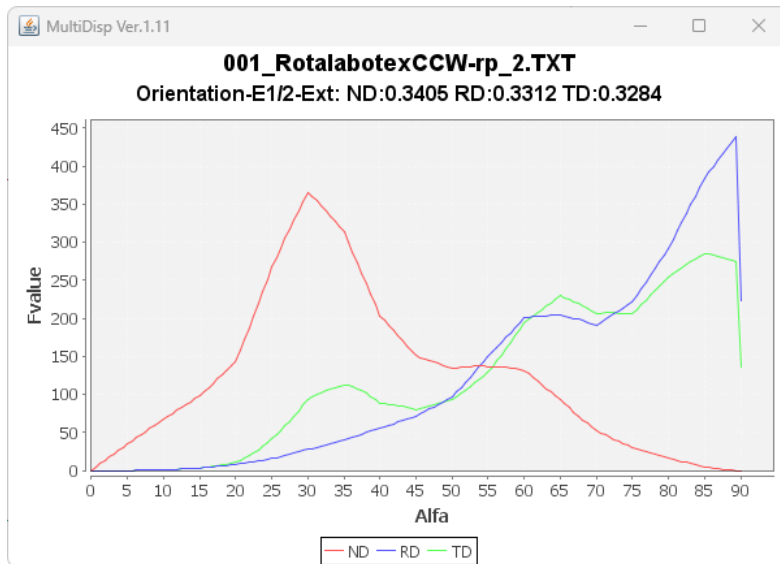


左極点図に以下の回転を行って右極点図を作成



LaboTex の KearnsFactor が得られます。

従来のOrientationで計算



001_RotalabotexCCW-rp_2.TXT

Kearns Method: ND:0.3408 RD:0.3312 TD:0.328

001_RotalabotexCCW-rp_2.TXT

Orientation-E1/2: ND:0.3403 RD:0.3314 TD:0.3283

001_RotalabotexCCW-rp_2.TXT

Orientation-E1/2-Ext: ND:0.3405 RD:0.3312 TD:0.3284

R I N T 2 0 0 0

	ND	RD	TD
f	0.34033	0.33141	0.32826
F	0.01050	-0.00289	-0.00761

終端処理を行うが、でーた 8 拡張は行っていない。

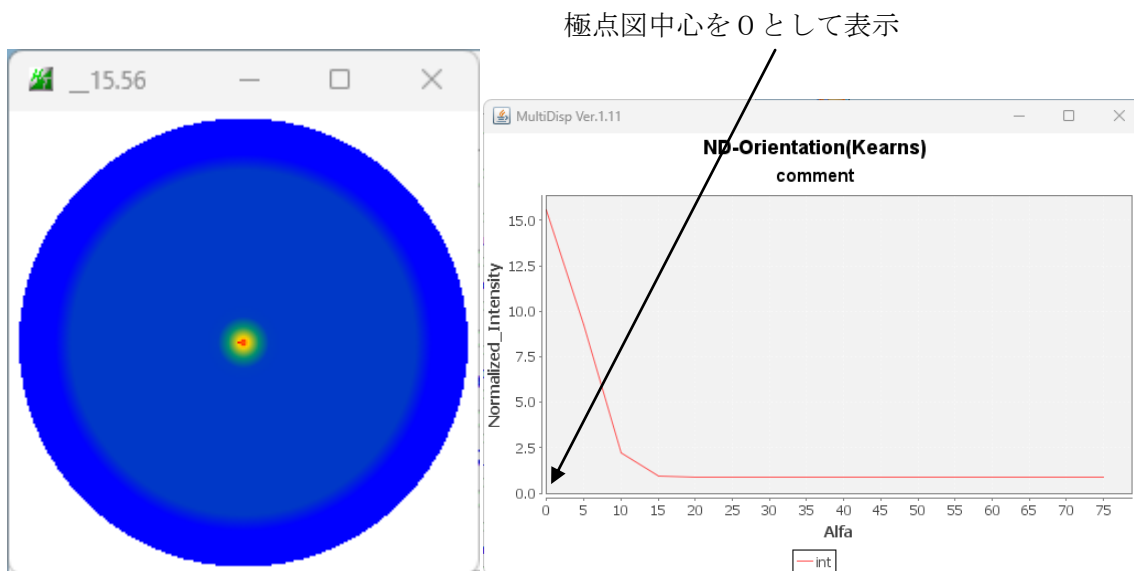
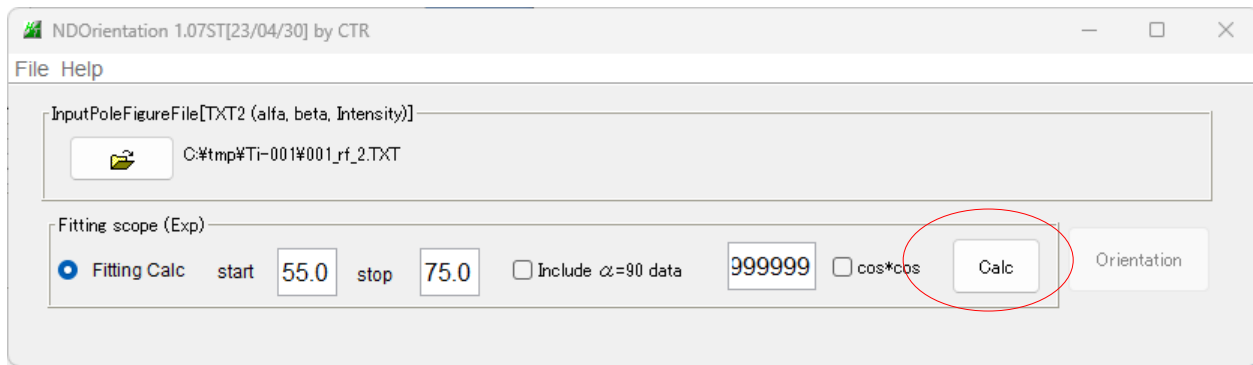
終端処理を行わない場合、値が異なる。

001_RotalabotexCCW-rp_2.TXT

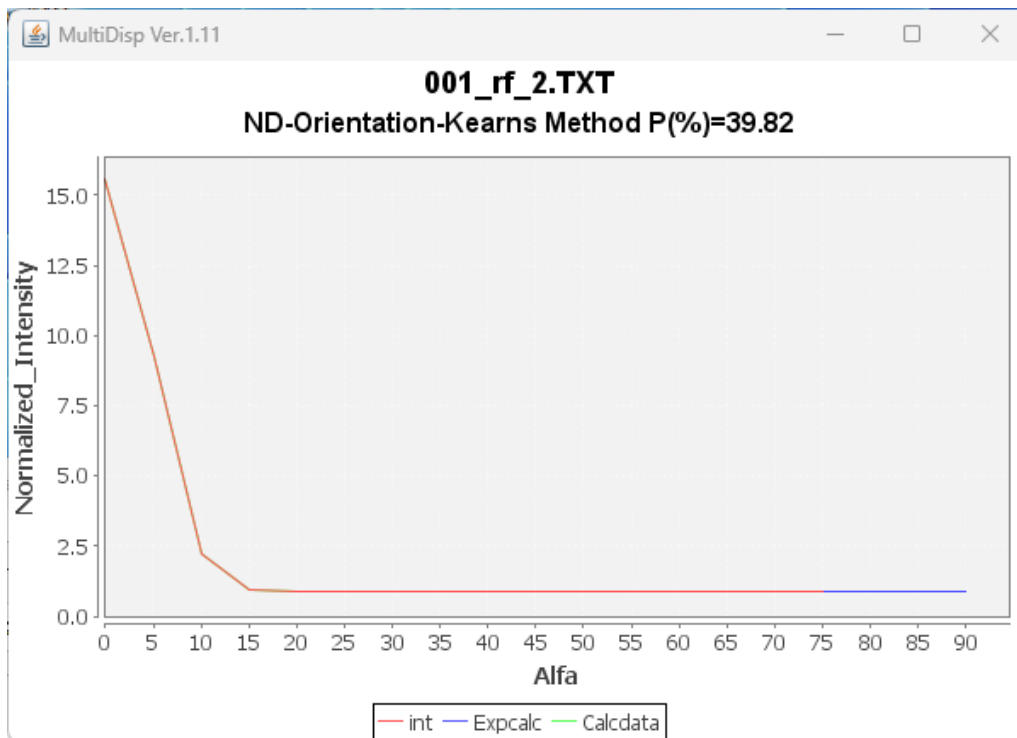
Orientation: ND:0.3228 RD:0.3464 TD:0.3309

Titanium 反射極点図 {0001} から完全極点図を外挿し配向関数の計算

$\alpha = 15 \rightarrow 90$ データ

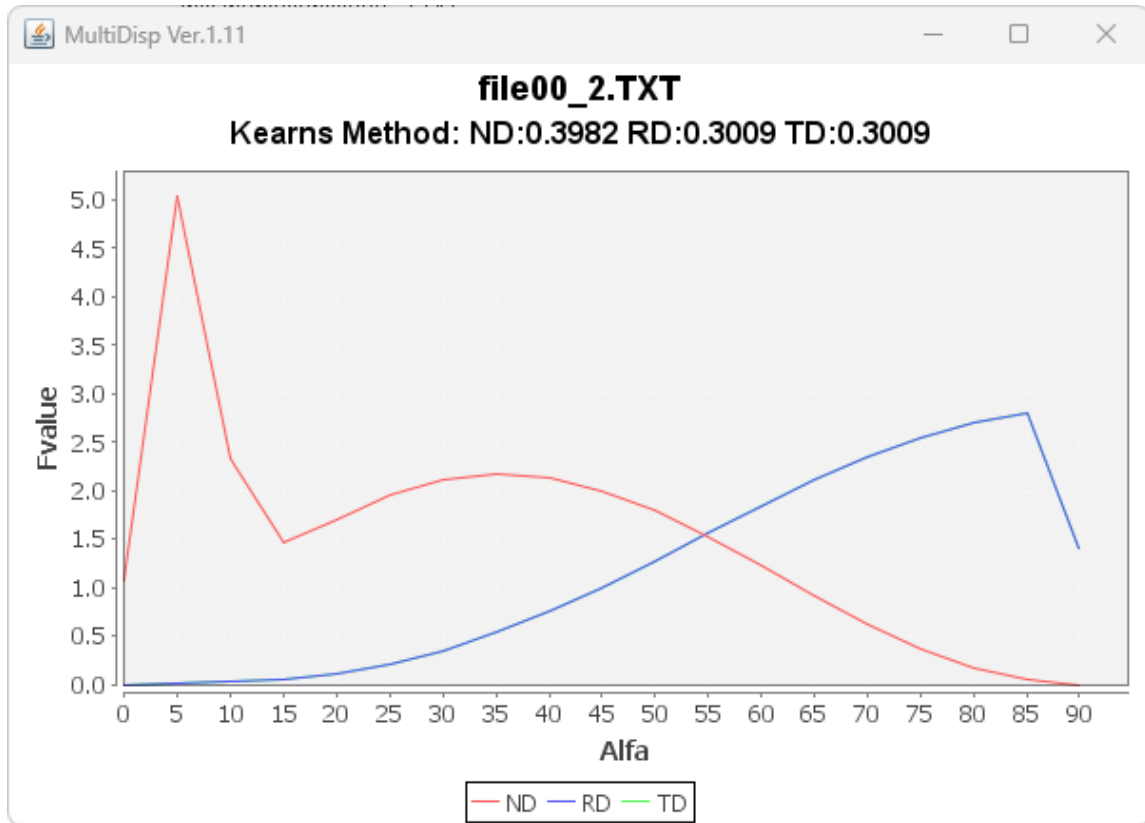
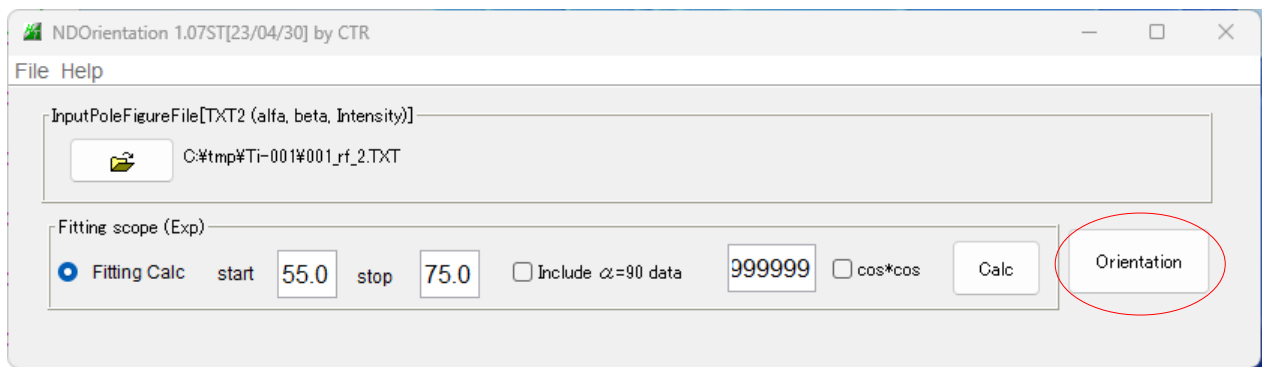


外挿を行い、P を計算

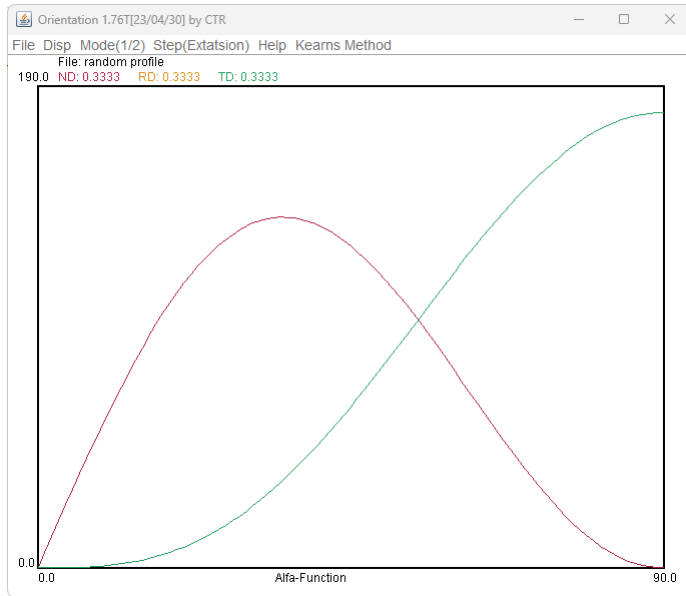


P : ND 方向の配向関数である。

ND,RD,TD 方向も計算

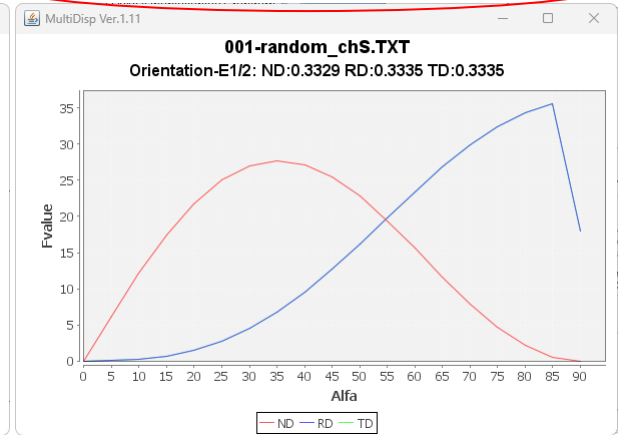
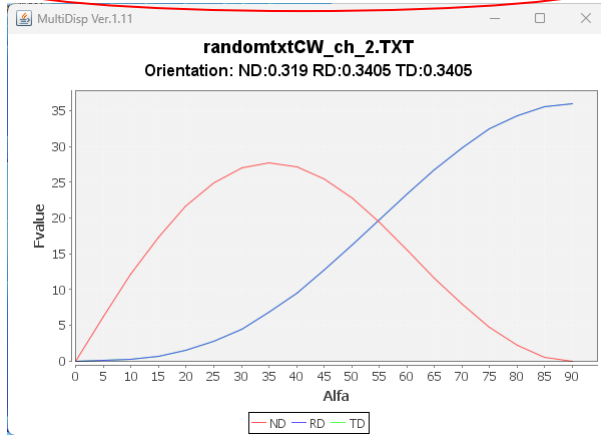


randomデータに対する各種計算手法比較



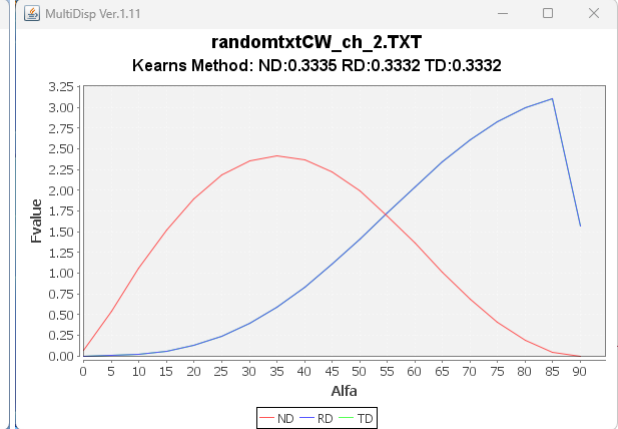
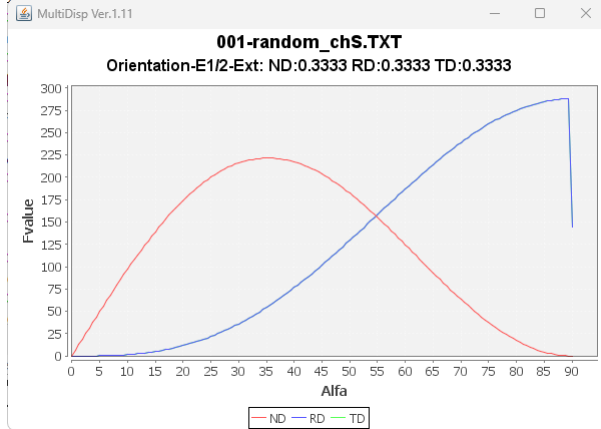
Mode(1) Step(Not Extension) Help Orientation

Mode(1/2) Step(Not Extension) Help Orientation



Mode(1/2) Step(Extension) Help Orientation

Mode(1/2) Step(Extension) Help Kearns Method

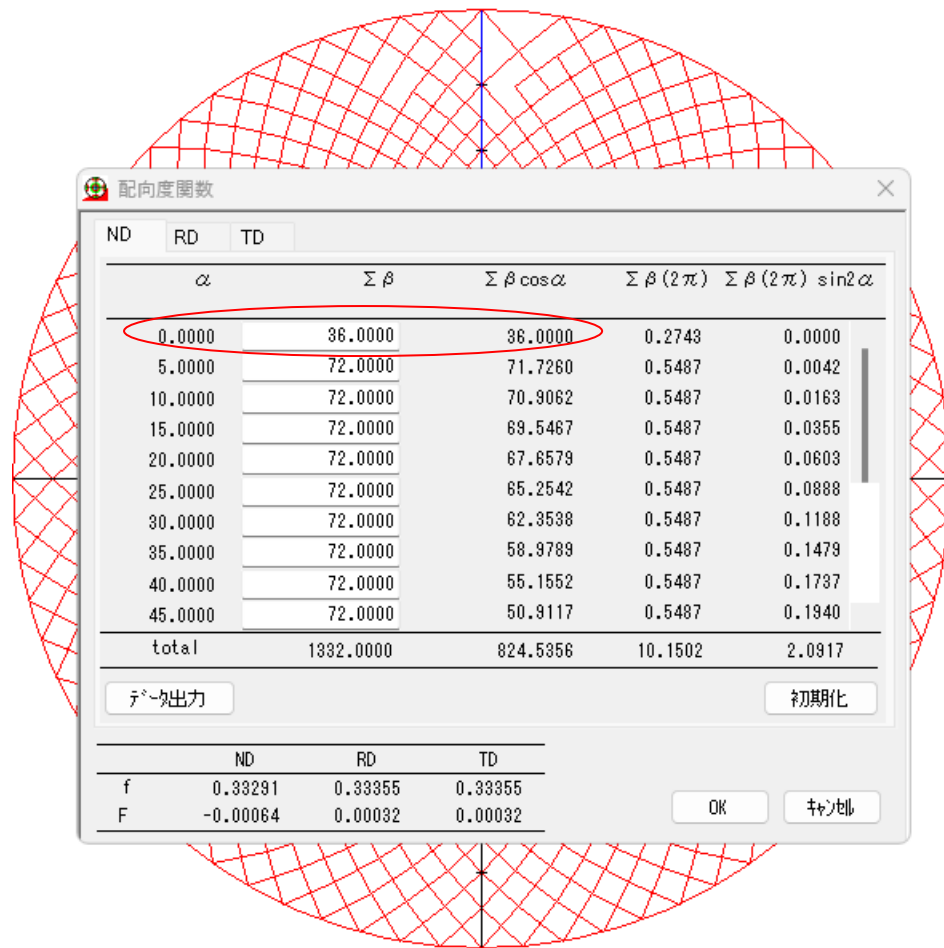


終端処理なし、データ保管なし

RINT2000

	ND	RD	TD
f	0.33291	0.33355	0.33355
F	-0.00064	0.00032	0.00032

RINT2000 計算結果



計算方法	終端処理	データ補間(Step)	ND	RD	TD
従来の方法	1	Step	0.319	0.3405	0.3405
終端処理	1/2	Step	0.3329	0.3335	0.3335
終端処理+データ補間	1/2	Step < 1.0	0.3333	0.3333	0.3333
RINT2000	1/2	Step	0.33291	0.33355	0.33355
KearnsMethod	1	Step	0.3335	0.3332	0.3332