

対称反射プロファイルによる逆極点の積分逆極点とピーク逆極点

2020年09月16日

*HelperTex Office*

## 概要

材料表面の面方向極点図表示に積分強度とピーク強度表示があり、方位の広がりにより値が変わり材料の特性がどのように現れるかシミュレーションを行ってみます。

材料特性としては、ODF解析後の結晶方位分布図から計算される定量値である **VolumeFraction** である。同一 **VolumeFraction** で広がりを変えた場合の比較を行い、その後 **r a n d o m**状態のプロファイルをプロファイルの幅を変えて比較を行う。

同一 VolumeFraction で方位の広がりを変える

広がりをも 10 deg とする。

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%

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\varphi_1$	FWHM $\Phi$	FWHM $\varphi_2$	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25 %
2	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25 %
3	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25 %
4	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25 %
5	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 2 3 1 } < -3 -4 6 > S-4	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Sample Name: BCCG25-10  
Project Name: Demo  
Cell Parameters (Relative): a: 1.0i, b: 1.0i, c: 1.0i,  $\alpha$ : 90.0,  $\beta$ : 90.0,  $\gamma$ : 90.0

FWHM  $\varphi_1$  = 10.0, FWHM  $\Phi$  = 10.0, FWHM  $\varphi_2$  = 10.0

Creation of Model ODF, Exit

広がりをも 30 deg とする

Crystal Symmetry: (Cubic)  
Sample Symmetry: Orthorhombic  
Grid Cells for Output ODF: 5.0\*5.0  
Step: 0.50  
Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 4. 100.0%  
Component No. 4. 100.0%  
Component No. 4. 100.0%

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\varphi_1$	FWHM $\Phi$	FWHM $\varphi_2$	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	25 %
2	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	25 %
3	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	25 %
4	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	25 %
5	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 2 3 1 } < -3 -4 6 > S-4	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

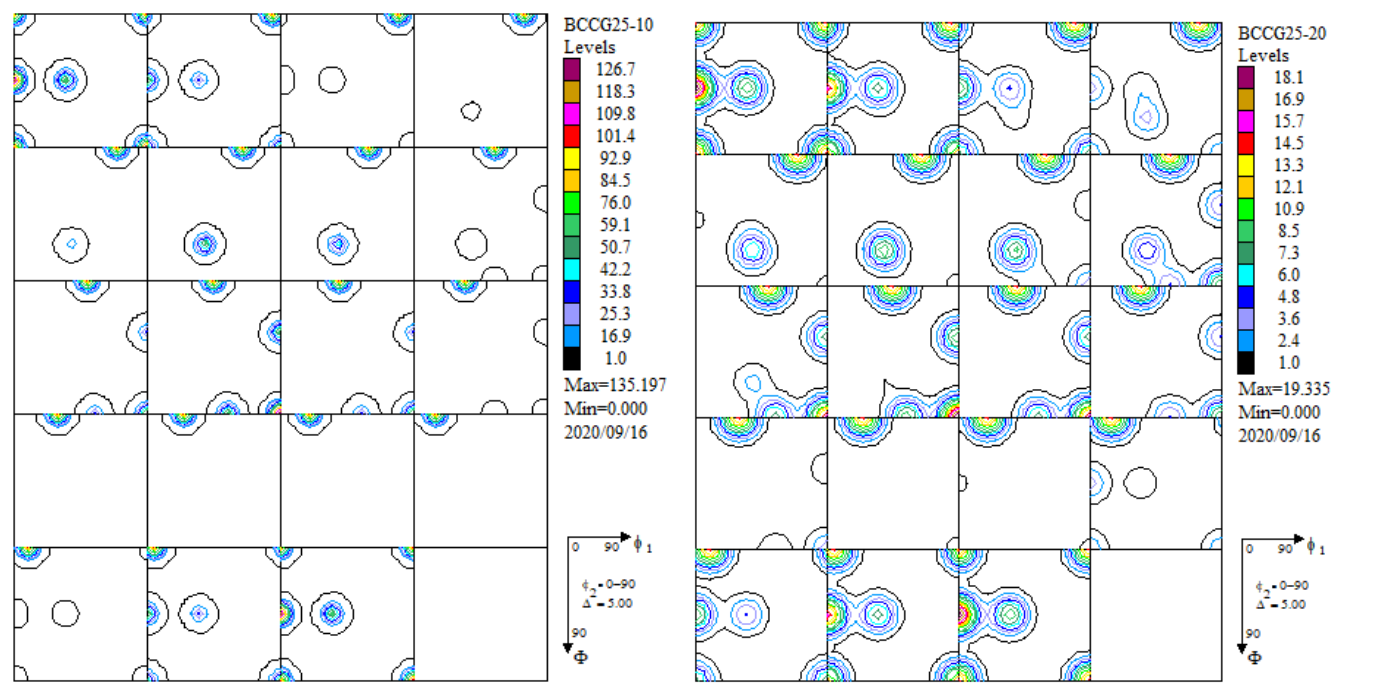
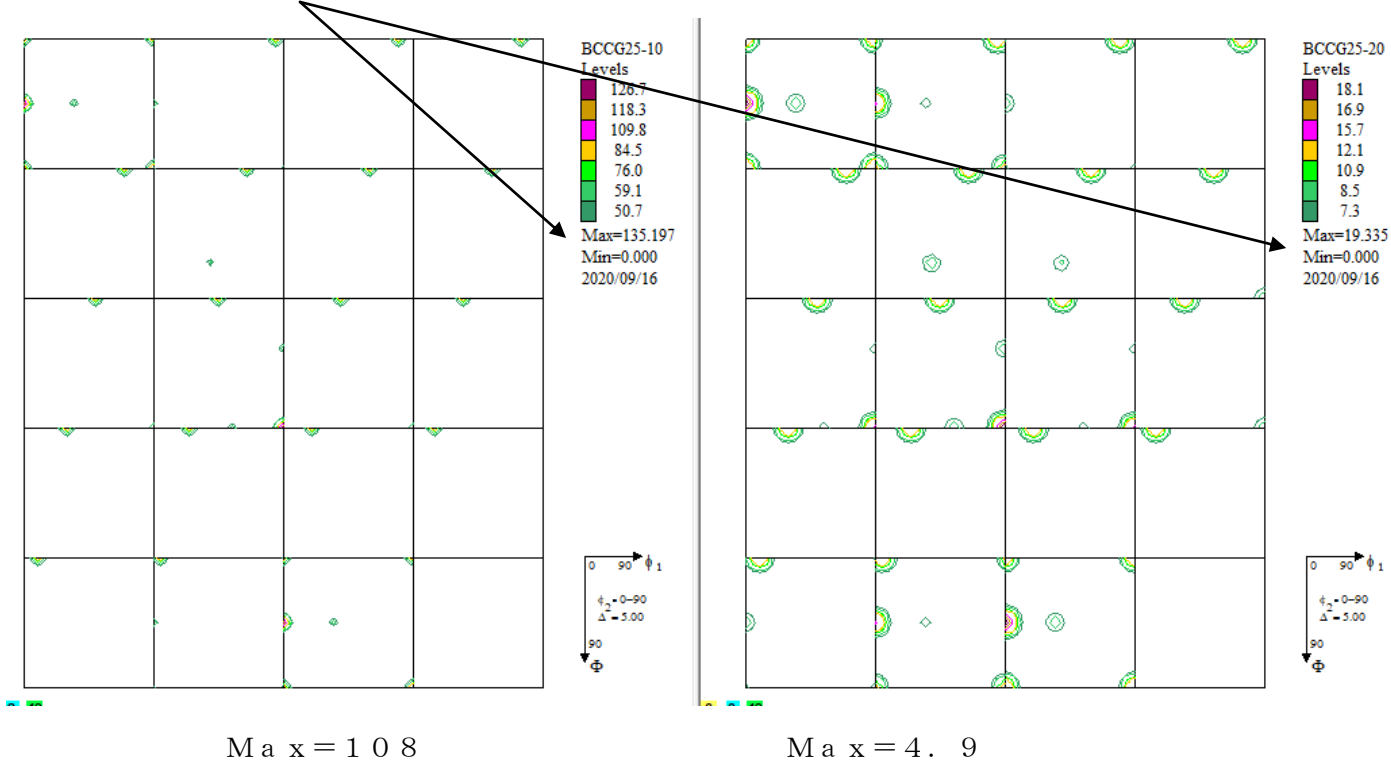
Sample Name: BCCG25-20  
Project Name: Demo  
Cell Parameters (Relative): a: 1.0i, b: 1.0i, c: 1.0i,  $\alpha$ : 90.0,  $\beta$ : 90.0,  $\gamma$ : 90.0

FWHM  $\varphi_1$  = 20.00, FWHM  $\Phi$  = 20.00, FWHM  $\varphi_2$  = 20.00

Creation of Model ODF, Exit

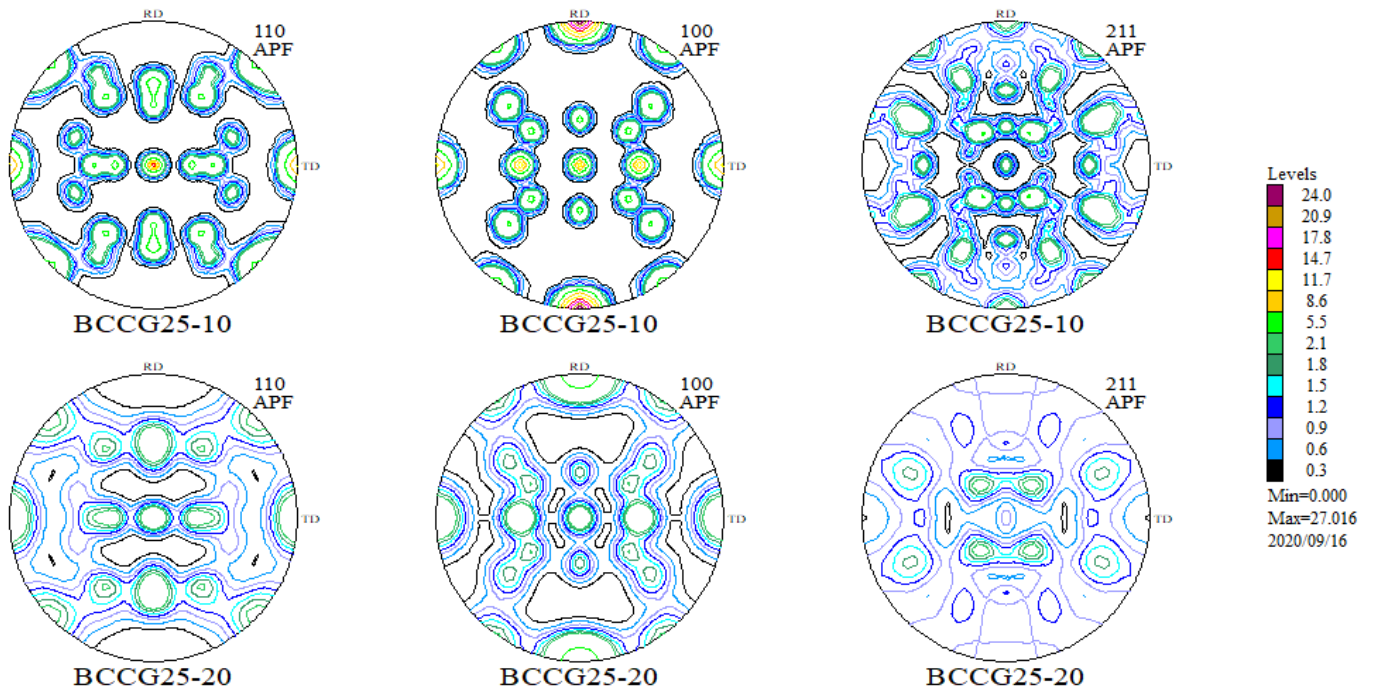
# ODF 図比較

方位密度の最大値が大幅に異なります。

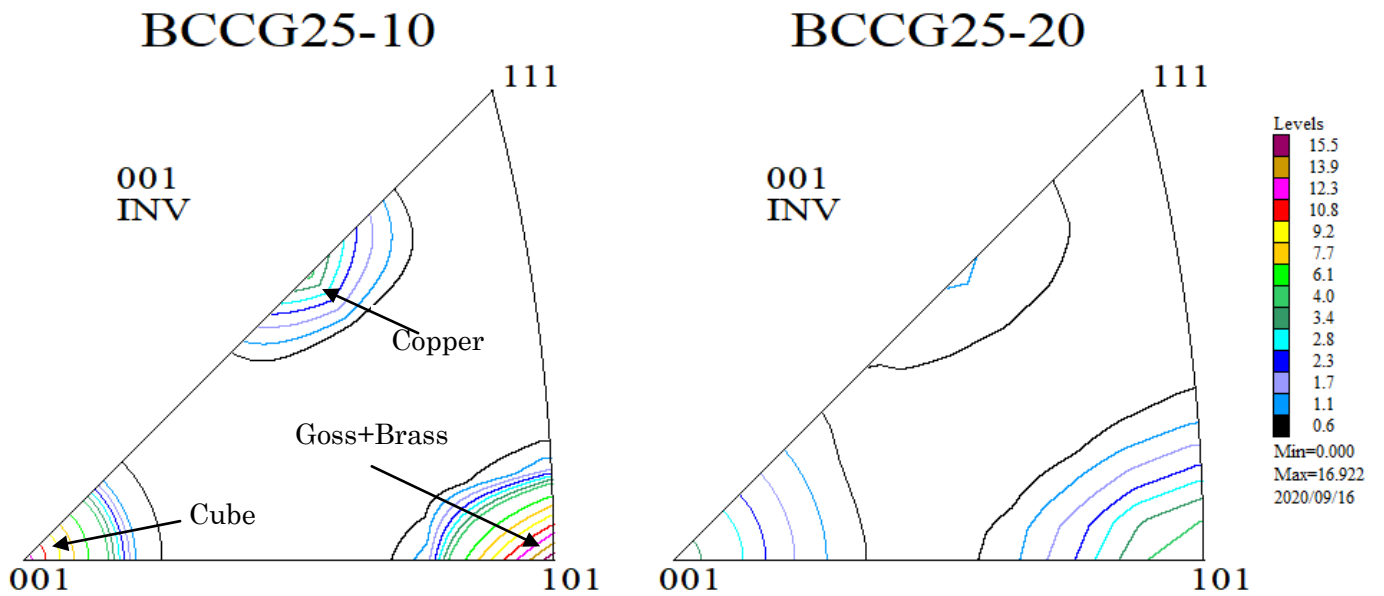


最大方位密度が異なり、方位分布が広がると最大方位密度が低下する

極点図比較



逆極点図比較



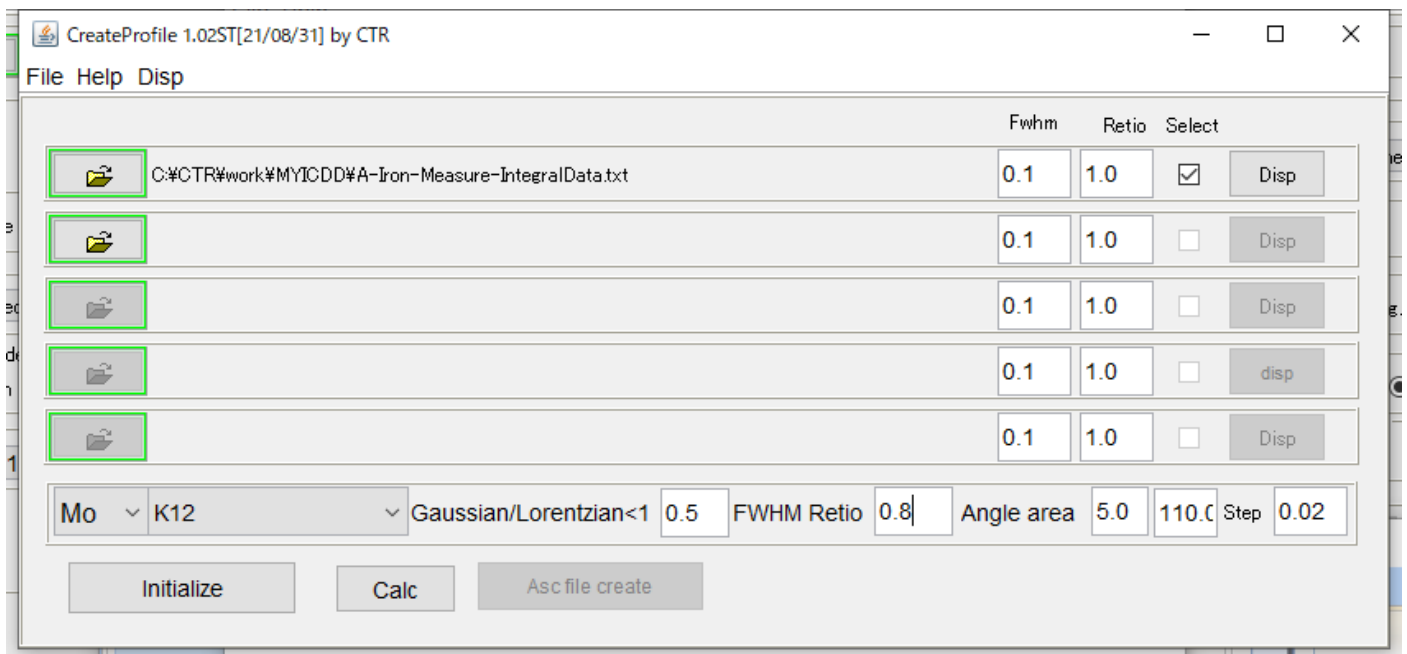
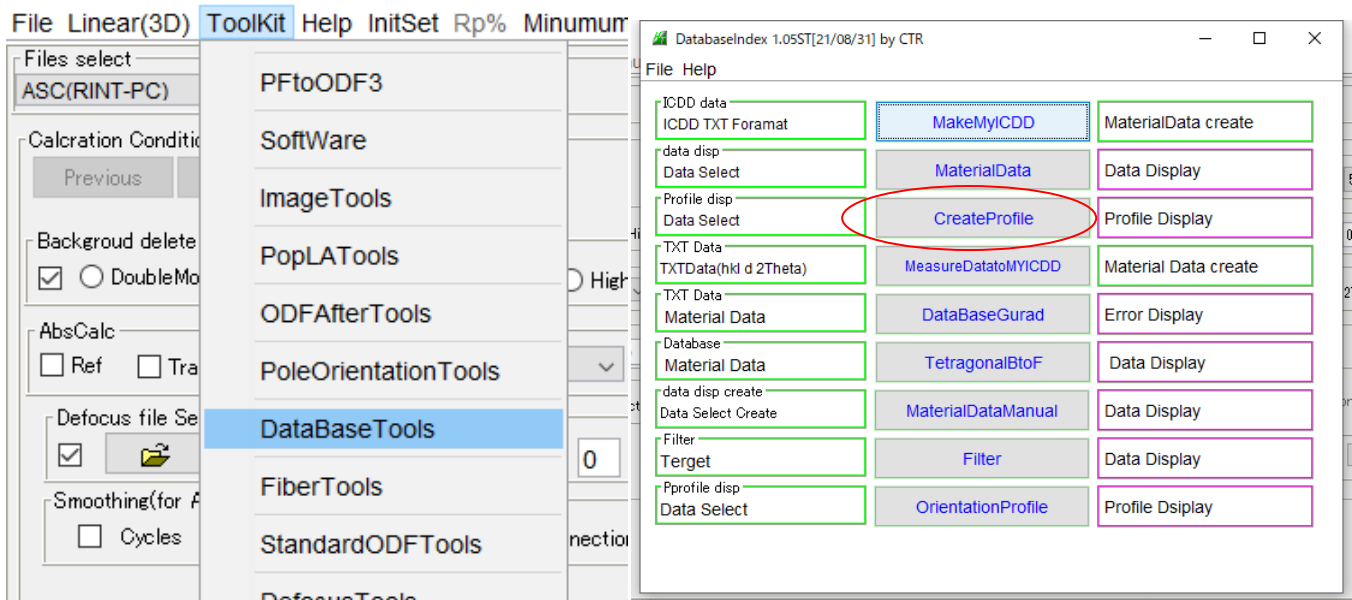
同一 VolumeFraction でも、方位の広がりが大きいと、方位密度は低下する。

Cube,Goss,Brass に対し、Copper は密度は ODF 図、極点図と同様に 1 / 2 で表示されます。

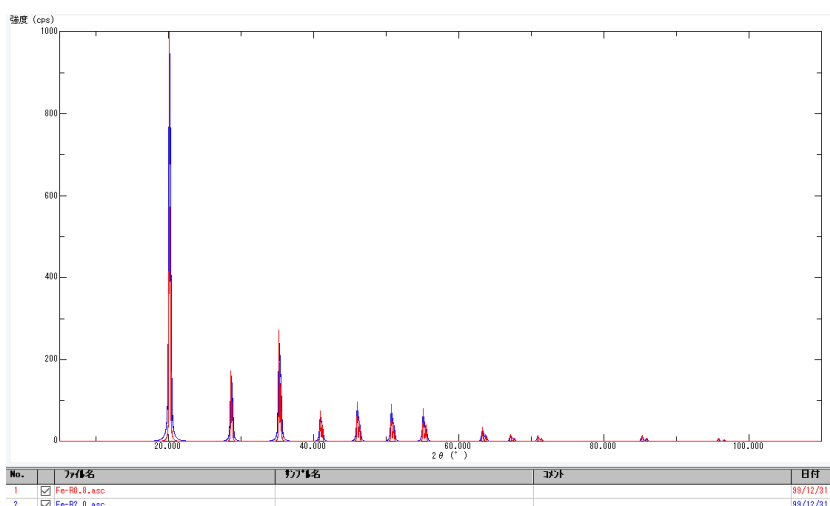
では対称反射を考えてみます。

randomプロファイルピーク強度を変えずに広がりを変えたデータを作成

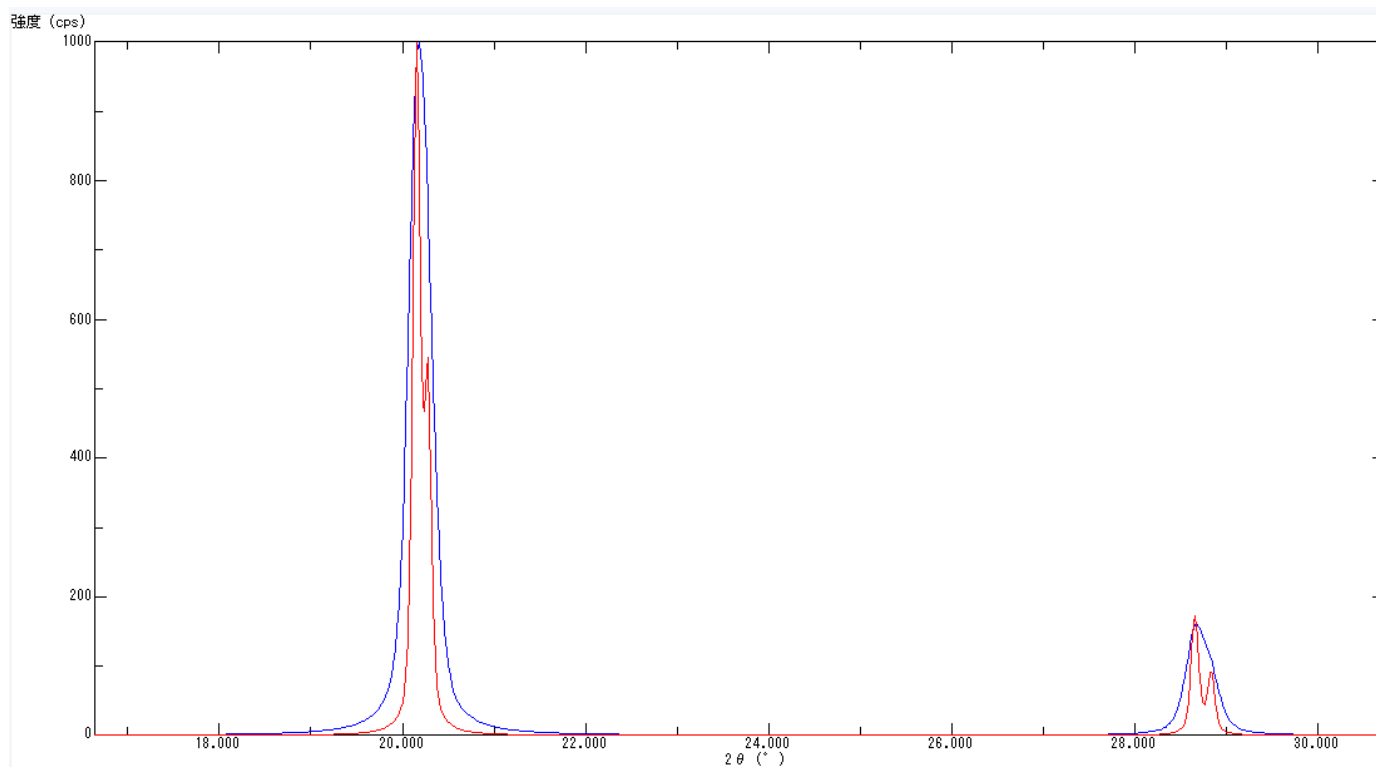
ODFPolefigure1.5 1.65T[21/08/31] by CTR



Resio を 0.8deg と 2.0deg を作成



## 拡大比較

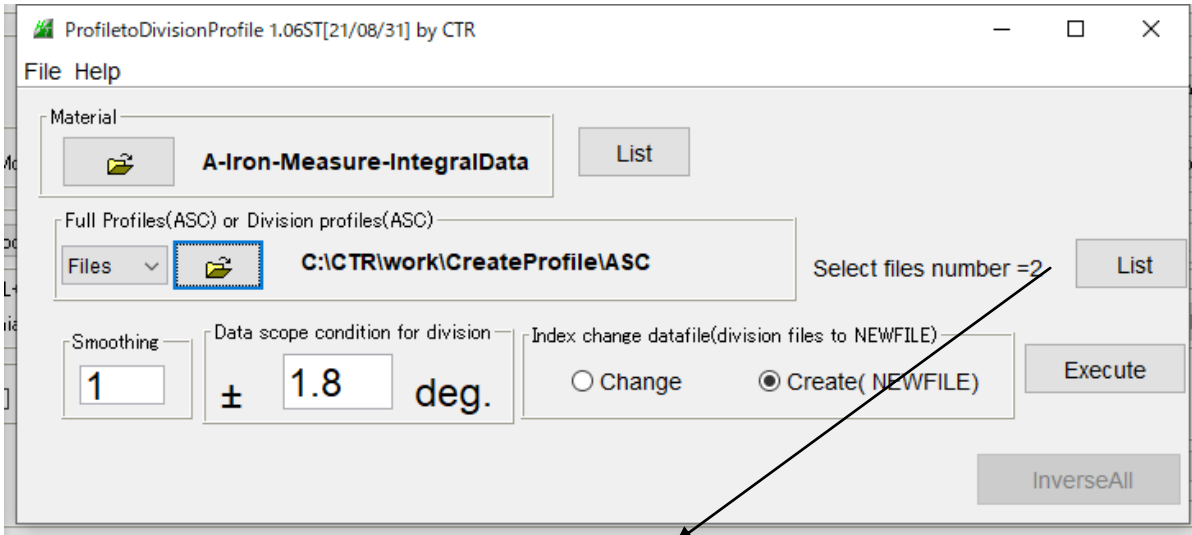


No.	ファイル名	物質名	コメント	日付
1	<input checked="" type="checkbox"/> Fe-R0.8.asc			99/12/31
2	<input checked="" type="checkbox"/> Fe-R2.0.asc			99/12/31

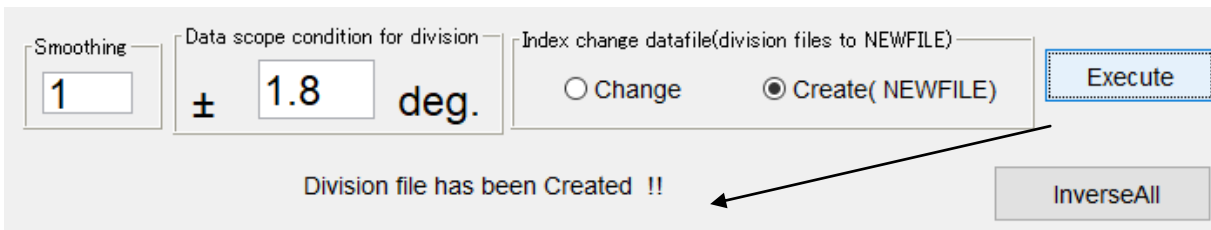
本来は、Resioが広がれば、ピーク強度が下がるが、プロファイル作成に機能がないため単にプロファイルの幅のみを変更して比較する。

この2つの連続プロファイルを分割して逆極点の計算を行う。

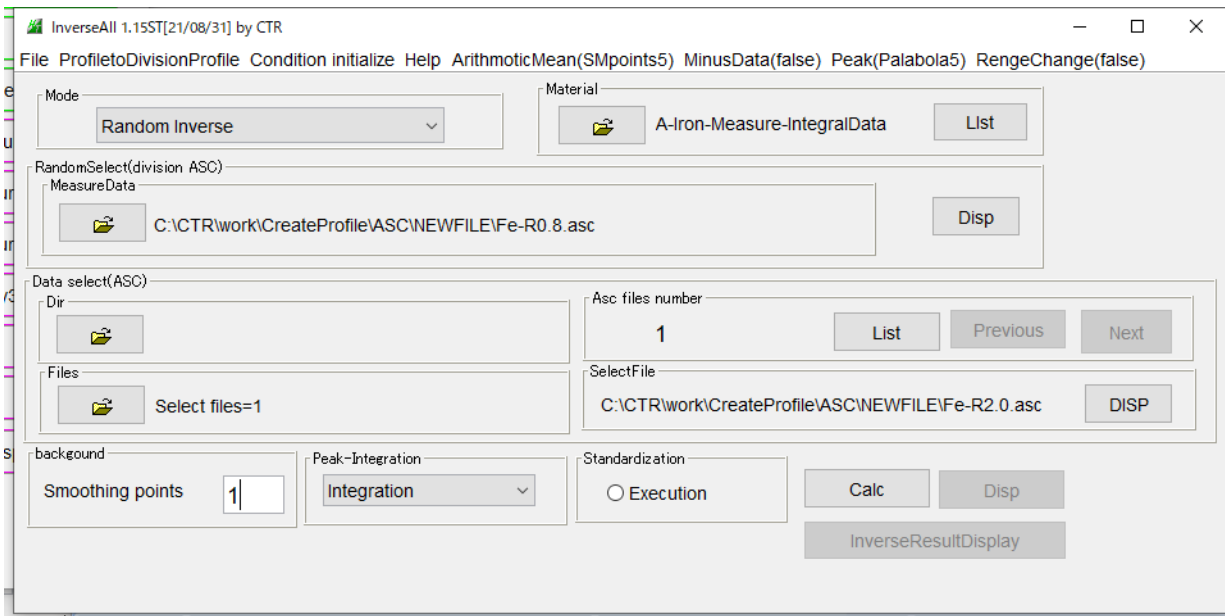
The image shows two software windows. The left window, 'ODFPoleFigure2 3.96T[21/08/31] by CTR', has a 'ToolKit' menu open with 'InverseTools' highlighted. The right window, 'InverseTools 1.13ST[21/08/31] by CTR', has a 'File' menu open with 'ProfiletoDivisionProfile' circled in red. The 'File' menu contains various options for profile manipulation and display, such as 'Asc Profile (or Division)', 'InverseAll', 'MeasureDatatoMYICDD', 'InverseDisplay', 'HexInverse 3D Display', 'Text Data', 'Direction-Plane Data disp', 'Inverse Contour Display', 'InverseContour Display', 'InverseDisplay36Box', 'resultDisplay', and 'Inverse 3D Display'.



C:\CTR\work\CreateProfile\ASC\Fe-R0.8.asc  
C:\CTR\work\CreateProfile\ASC\Fe-R2.0.asc



InverseAll で逆極点を比較する。Random を Resio0.8 sample に Resio2.0



積分強度

Randommode ArithmeticMean(SMpoints1) BGsmpts=1 Integration Minusdata-OFF

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]	[321]	[411]	[420]	[332]	[521]	[442]
Fe-R2.0	1.972	1.949	1.972	1.94	1.963	1.962	1.956	1.948	1.905	1.936	1.955	1.948

ピーク強度

Randommode ArithmeticMean(SMpoints1) BGsmpts=1 PEAK peakPalabola5 Minusdata-OFF

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]	[321]	[411]	[420]	[332]	[521]	[442]
Fe-R2.0	1.017	0.94	0.904	0.872	0.863	0.857	0.848	0.838	0.828	0.831	0.829	0.825

積分強度は方位の広がり考慮した逆極点であり、実態を表しています。

Random に対する比率なので、Cube に対する Copper のような比率は関係ありません。