

# MTEXODFソフトウェアによるVolume Fraction計算の注意点

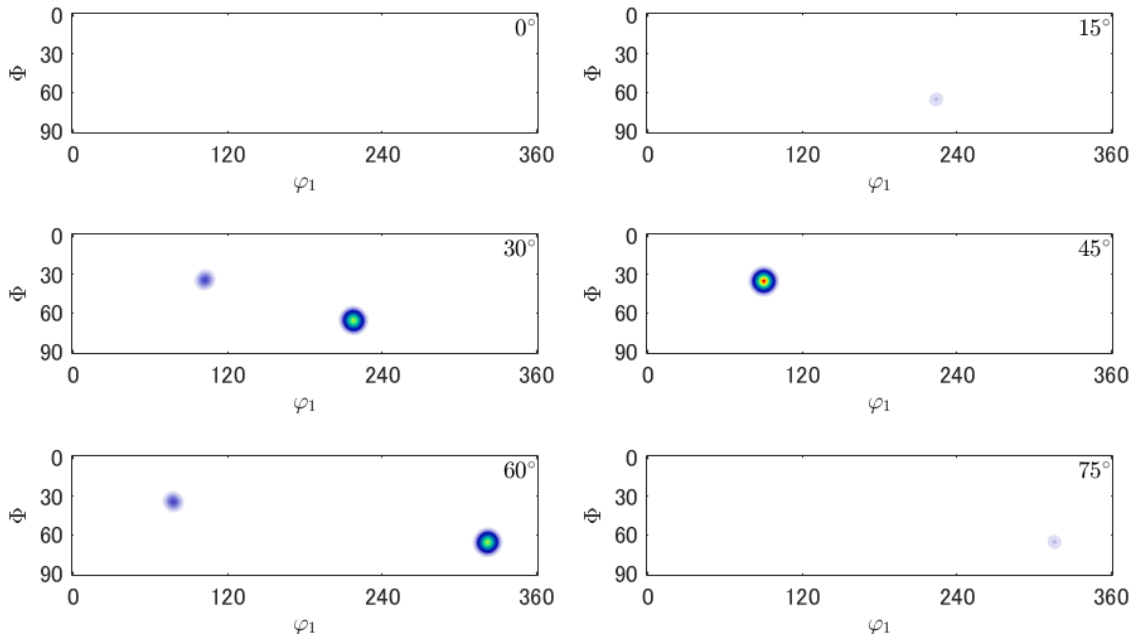
2025年03月31日

*HelperTex Office*

## 1. 概要

MTEXはEBSDとXRDの解析を行い、シュミレーションも行える。  
方位をシュミレーションで計算すると、Triclinicで計算されている。  
例えば、copperをシュミレーションすると

```
CS= crystalSymmetry('cubic')
SS = specimenSymmetry('1') //triclinic
copper= orientation.byMiller([1 1 2],[1 -1 1],CS,SS)
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)
odf=unimodalODF(copper,psi)
```



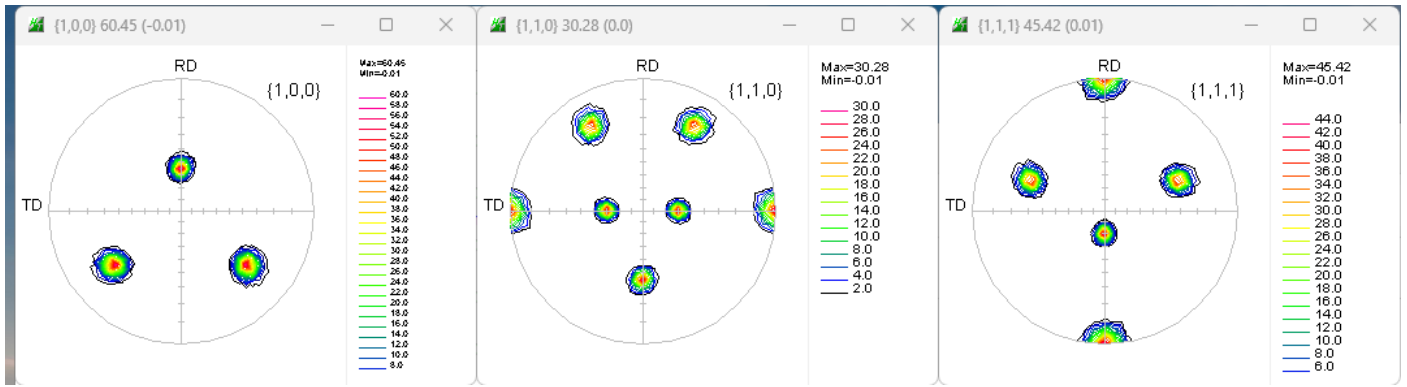
```
[value,ori]=max(odf,'numLocal',5)
value = 512.4413 512.3739
ori = orientation (m-3m -> xyz)
size: 1 x 2
Bunge Euler angles in degree
phi1 Phi phi2 Inv.
90.028 35.2488 225.013 0
90.0159 35.3289 224.939 0
volume(odf,copper,15*degree)
ans = 0.9939
```

しかしXRDデータは上記データではなく、Orthorhombic化されたデータを測定している。

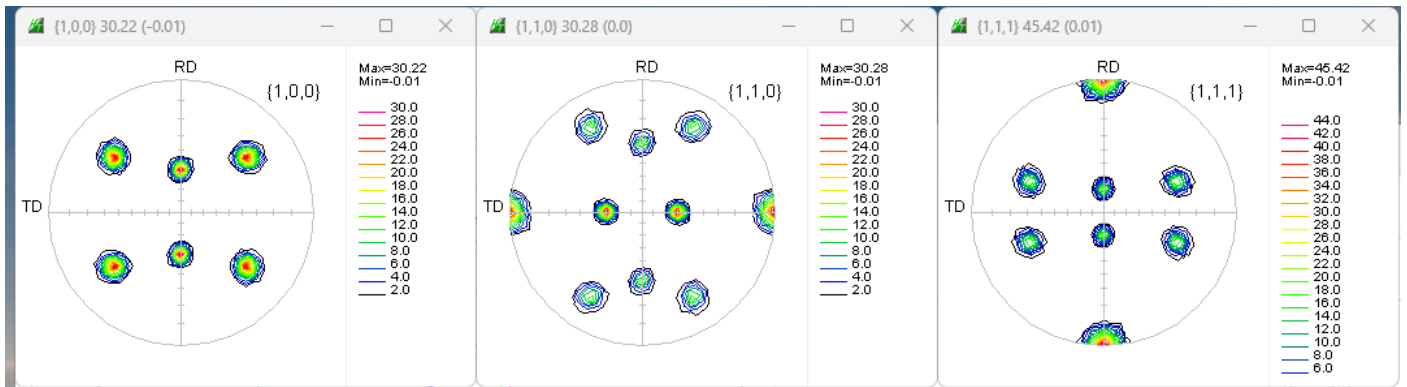
このため、XRデータからVolumeを求める場合、MTEXの解析は

```
SS = specimenSymmetry('orthorhombic')
として解析を行う。
```

# Exportされた極点図

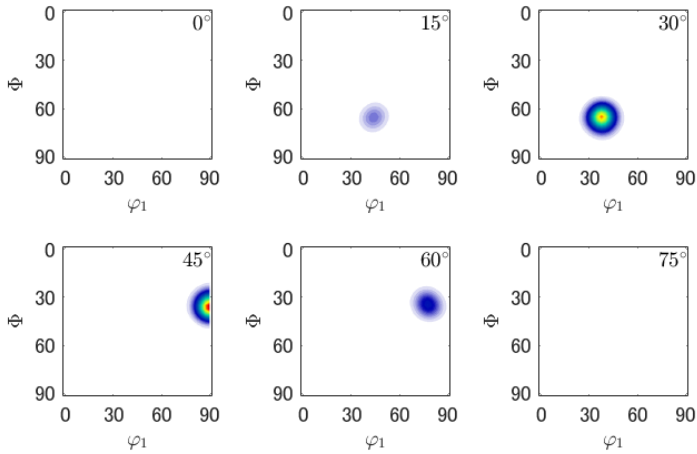


# XRDで測定される極点図



XRD測定データから volume を求める。

```
>> import_wizard
>> ortho
SS = specimenSymmetry('1') ->SS = specimenSymmetry('orthorhombic')
>> SS = specimenSymmetry('orthorhombic')
新し SS で pf を計算
>> pf = PoleFigure.load(fname,h,CS,SS,'interface','xrd');
>> odf=calcODF(pf)
```



```
copper= orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS,SS)
>> [value,ori]=max(odf,'numLocal',5)
value = 158.8513 86.9210 0.1048 0.0699 0.0218
ori = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
size: 1 x 5
Bunge Euler angles in degree
phi1 Phi phi2 Inv.
90.0612 36.1843 225.058 0
139.98 60.3467 244.524 0
163.354 47.5175 203.894 0
140.808 19.3372 206.489 0
161 25.9808 161.513 0
>> volume(odf,copper,15*degree)
progress: 100%
ans = 0.9489
```

Orthorhombic で XRD の体積分率を求められる。

方位が不明な場合

```
>> [value,ori]=max(odf,'numLocal',5)
```

```
value = 158.8513 86.9210 0.1048 0.0699 0.0218
```

```
ori = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
```

```
size: 1 x 5
```

```
Bunge Euler angles in degree
```

```
phi1 Phi phi2 Inv.
```

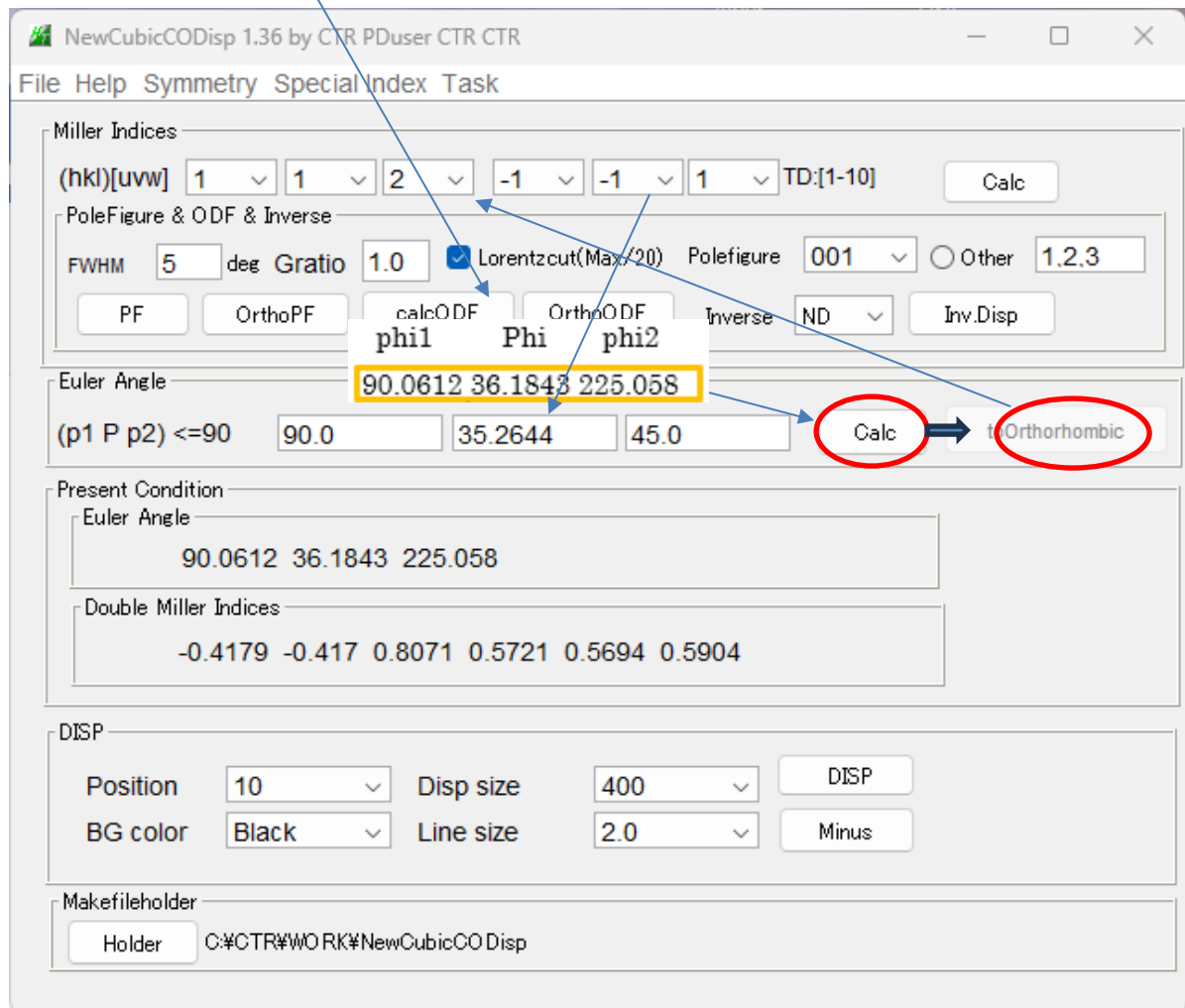
```
90.0612 36.1843 225.058 0
```

```
139.98 60.3467 244.524 0
```

```
163.354 47.5175 203.894 0
```

```
140.808 19.3372 206.489 0
```

```
161 25.9808 161.513 0
```



```
phi1 Phi phi2
```

```
90.0612 36.1843 225.058 を入力し。calc -> toOrthorhombic
```

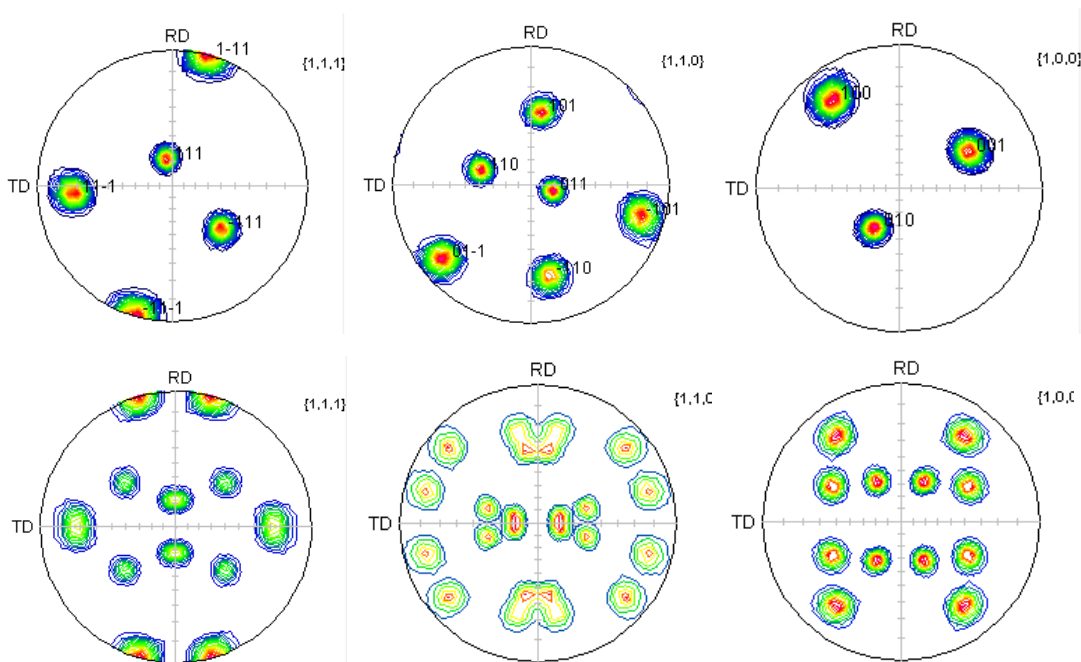
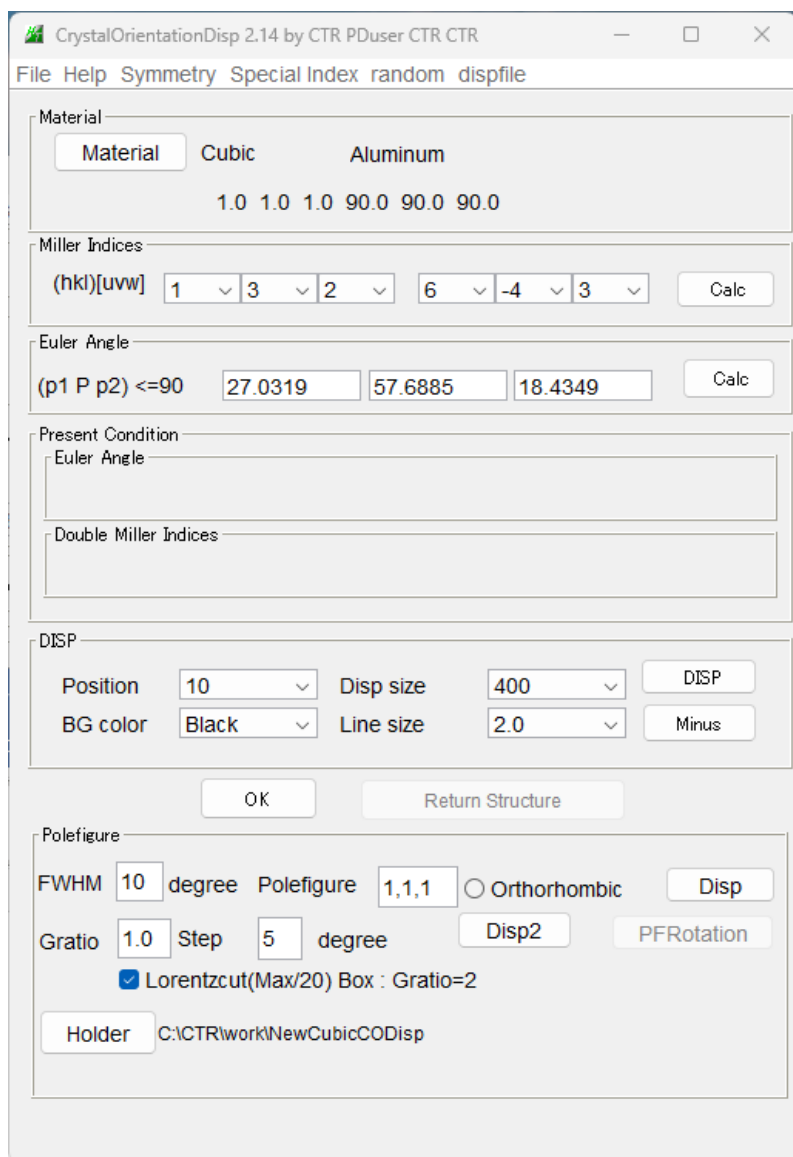
```
(p1 P p2) <=90 から 90. 0, 35. 36, 45. 0 -> (1 1 2) [-1 -1 1]
```

```
copper=orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS,SS)
```

あるいは

```
copper=orientation.byEuler(90.0*degree,35.26*degree,45.0*degree,CS,SS)
```

## S方位の場合



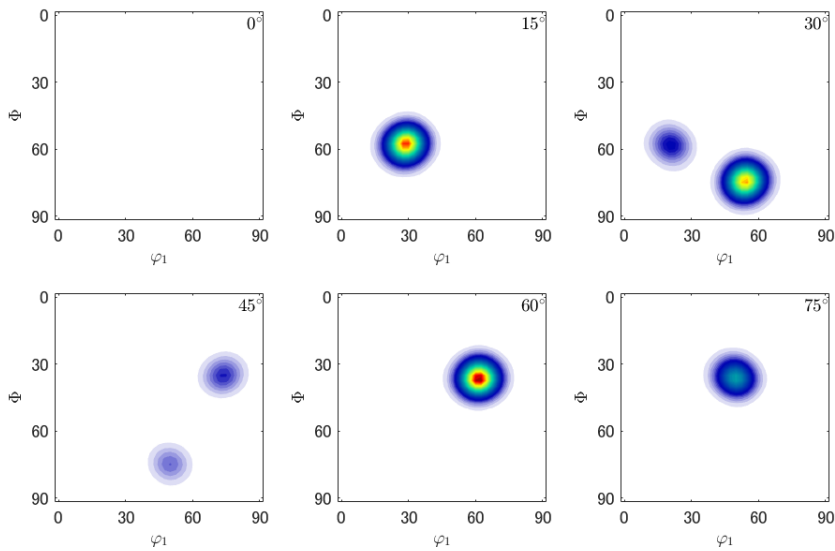
orthorhombicをtriclincで解析を行うとS方位のvolumeは1/4になります。  
brass.copper方位は1/2

Orthorhombicデータをimportした後

```
SS = specimenSymmetry('orthorhombic')
```

```
pf = PoleFigure.load(fname, h, CS, SS, 'interface', 'xrd');
```

```
odf=calcODF(pf)
```



```
>> [value,ori]=max(odf,'numLocal',5)
```

```
value = 64.0962 36.1868 24.5402 8.9308 9.2960
```

```
ori = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
```

```
size: 1 x 5
```

Bunge Euler angles in degree

phi1	Phi	phi2	Inv.
121.181	36.5843	206.618	0
149.798	53.5136	251.081	0
146.455	52.6741	255.665	0
76.7706	36.0198	317.236	0
74.491	30.7637	318.827	0

```
> s=orientation.byMiller([1 2 3],[6 3 -4],CS,SS)
```

```
volume(odf,s,15*degree)
```

```
progress: 100%
```

```
ans = 0.9175
```

Triclinicで計算

```
SS = specimenSymmetry('1')で ODF 解析
```

```
>> volume(odf,s,15*degree)
```

```
ans = 0.2269
```