

XRD極点図をMTEXで解析

XRDデータからMTEXでODF計算する場合、半価幅が狭い場合
EBSDデータと同様に、f w h mは2度が適当であるが、
半価幅が広い場合、f w h m 5度は適当である。

2021年01月23日

HelperTex Office

概要

最近、E B S Dデータを扱っていたが、E B S DデータのODF解析では、一般的なパラメータでは異常に丸みを帯びたODF図が描画される。

```
odf=calcDensity(ebsd('Aluminum').orientations)
```

このパラメータでは、`halfwidth=10deg` で計算される

E B S DデータをS O Rフォーマットに変換するとL a b o T e xでODF計算が出来る。

L a b o T e xと同じようなODF図を計算するには、

```
odf = calcDensity(ebsd('Aluminum').orientations,'halfwidth',2*degree)
```

とする。

同じようにX R D極点図からODF計算する場合のパラメータを調べる。

方位半価幅を5degと15degをLaboTexで作成し調べてみる

入力データ（半価幅5 d e g）

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM Φ_1	FWHM Φ	FWHM Φ_2	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	5.00	5.00	5.00	20 %
2	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
3	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
4	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	5.00	5.00	5.00	20 %
5	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 1 1 1 } < -1 1 2 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 1 0 1 } < 5 2 5 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

☒ Max. Linearity

Background 60 %

Sample Name: bragoss

Project Name: Demo

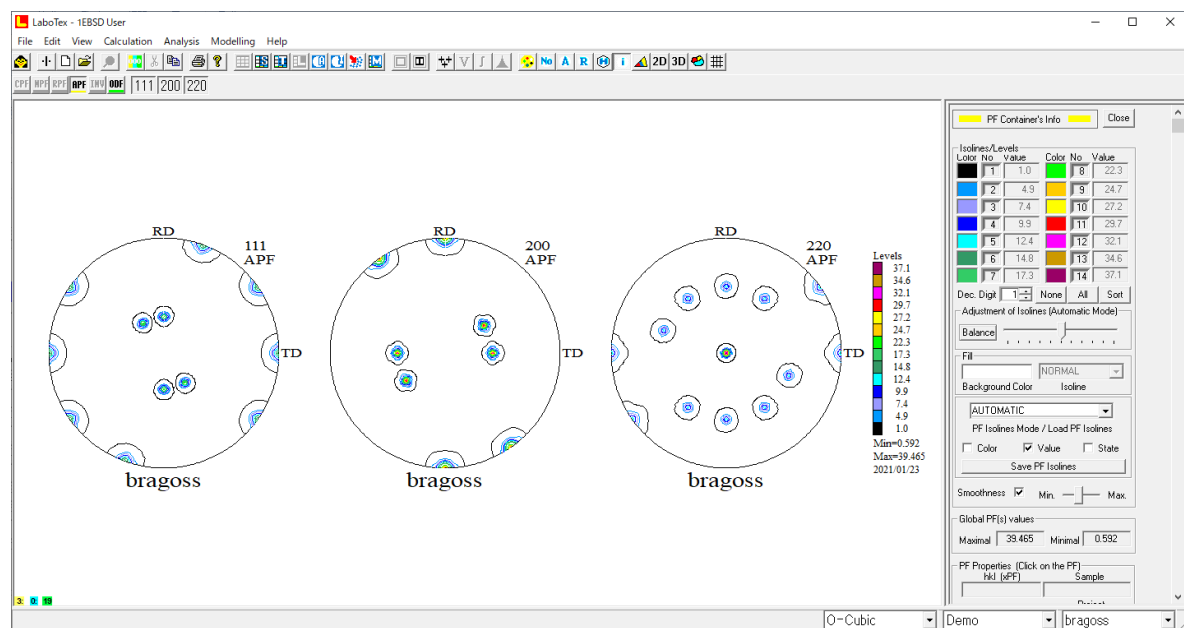
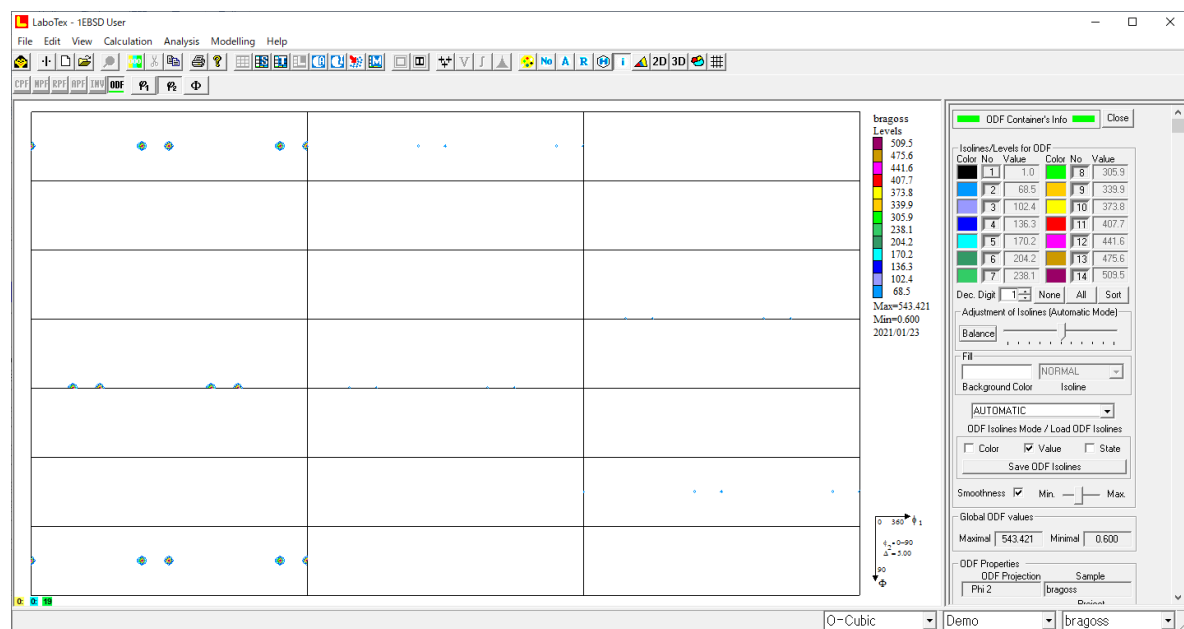
Cell Parameters (Relative): a: 1.0, b: 1.0, c: 1.0, α: 90.0, β: 90.0, γ: 90.0

Creation of Model ODF

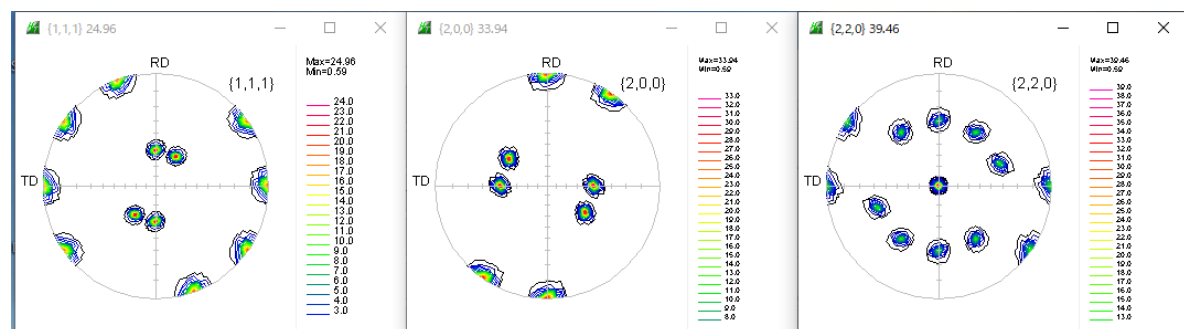
Exit

でODF図を作成し、極点図をE x p o r t し、M T E Xで計算する。

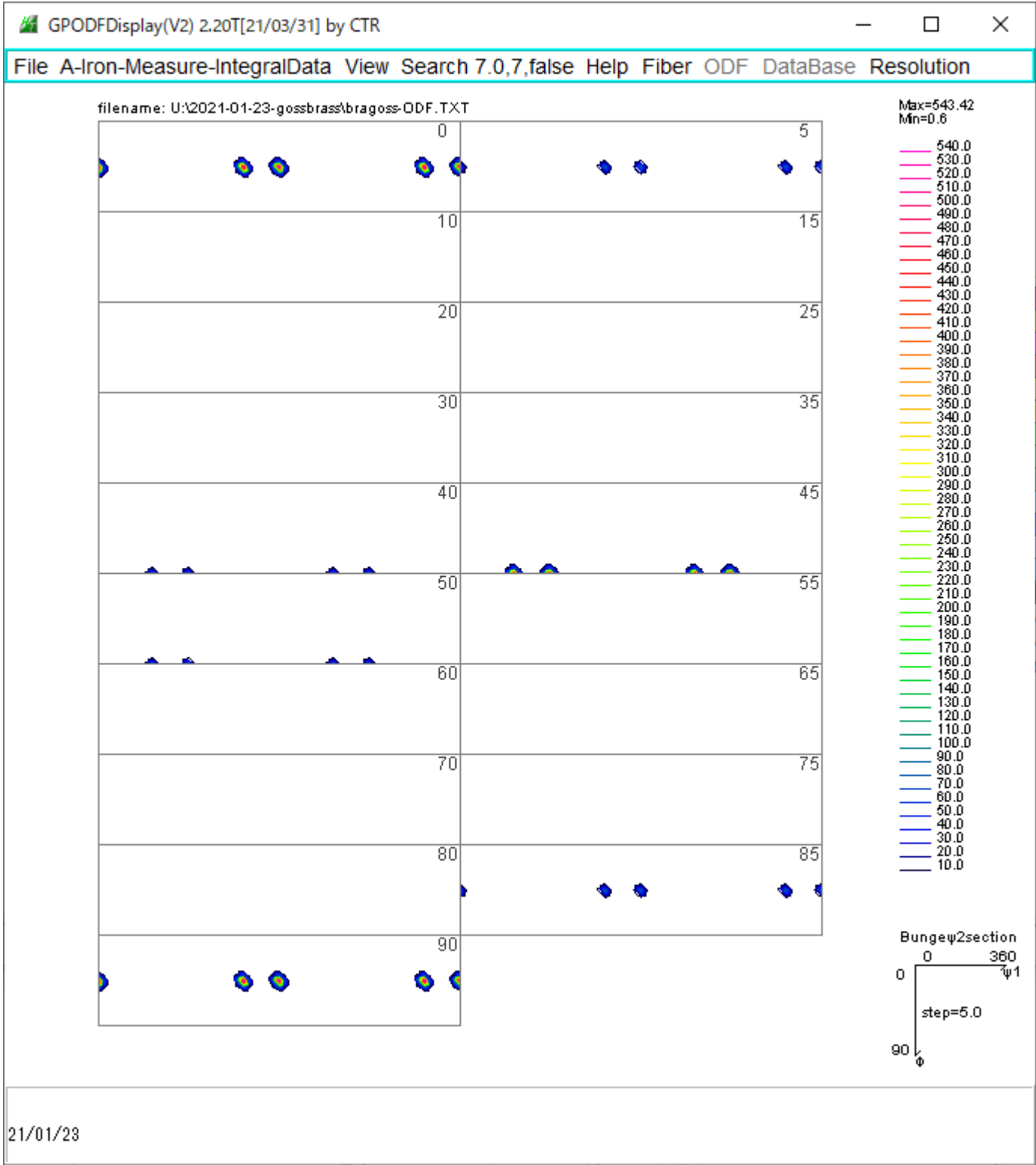
LaboTexの結果



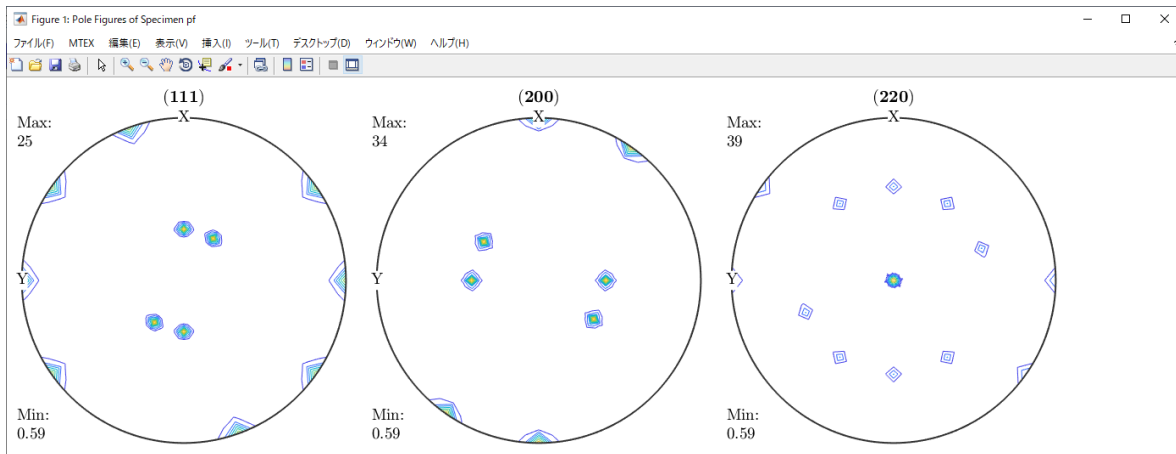
MTEXに入力する極点図



目標とするODF図（LaboTexのODF図をExportし、CTRで表示）



MT E Xに読み込む



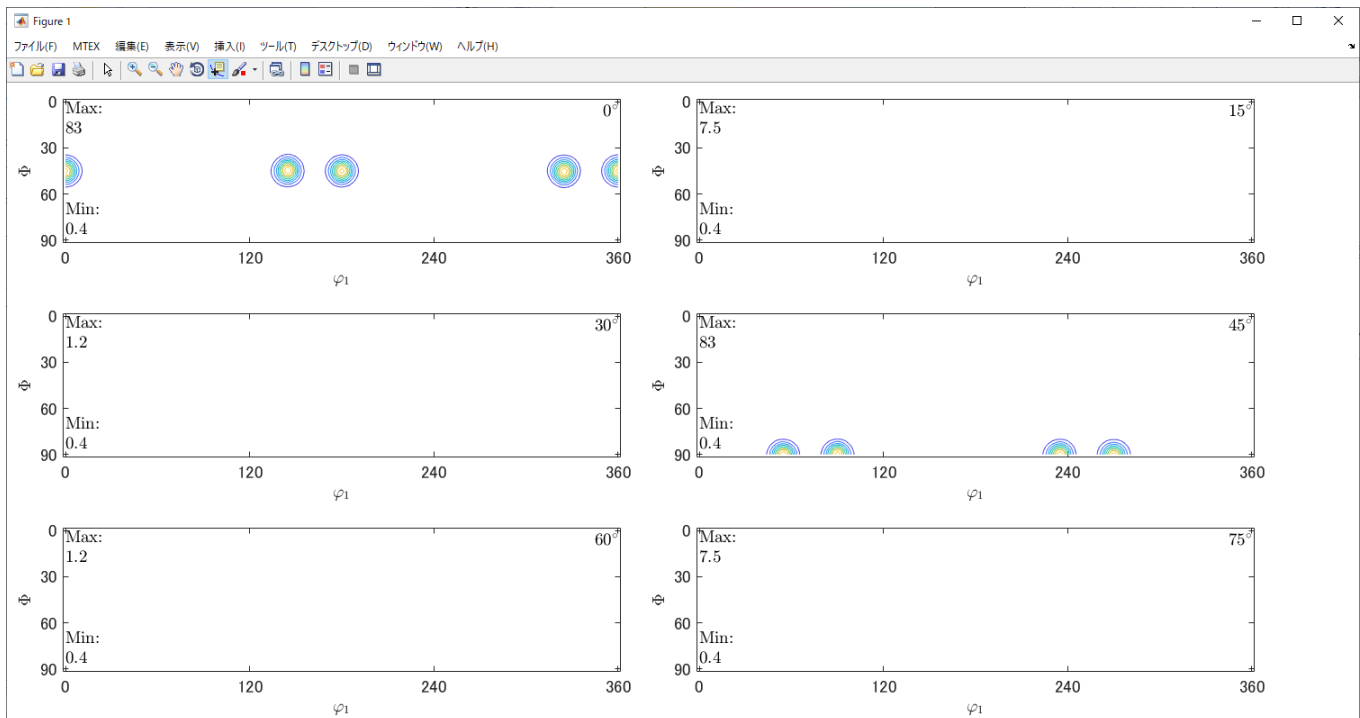
Odf=calcODF(pf)では fwhm=5deg

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°

center: 4936 orientations, resolution: 5°

weight: 0.60142



目標方位密度 5 4 3 に対し、8 3 である。

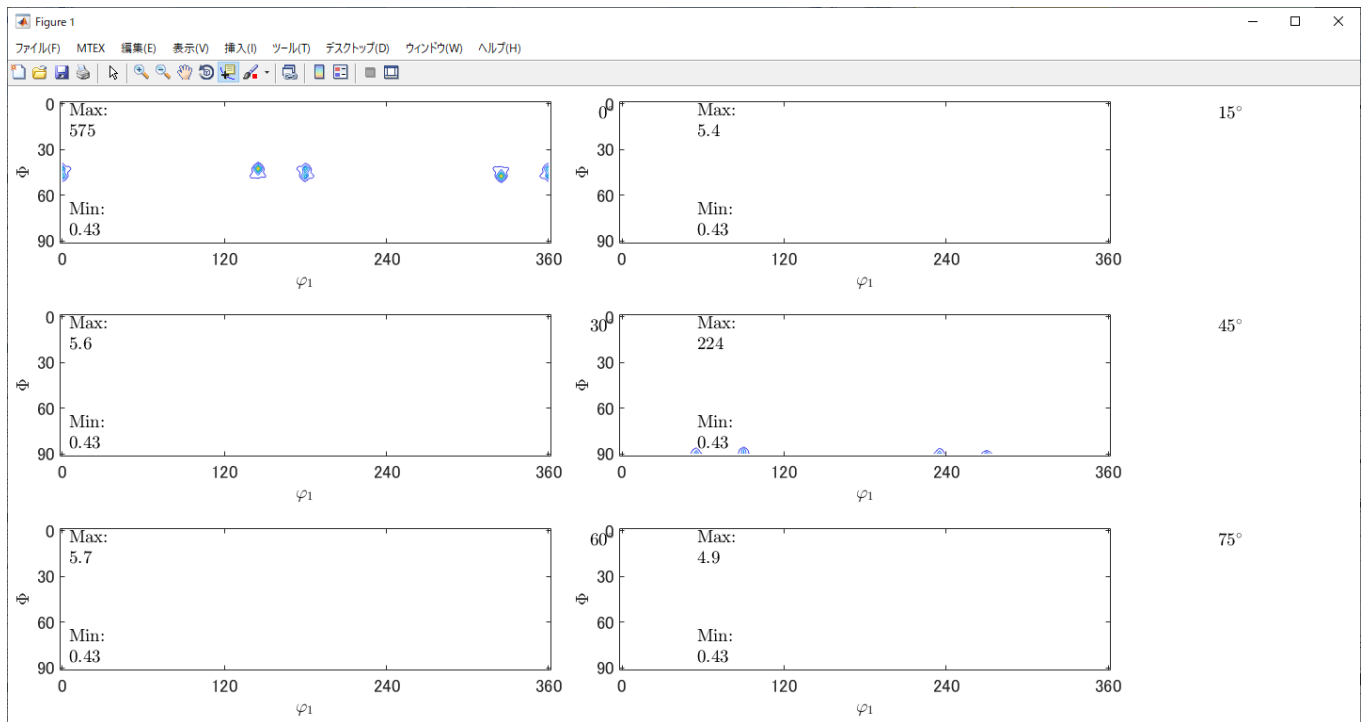
```
odf2=calcODF(pf,'halfwidth',2*degree)
```

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 2°

center: 4930 orientations, resolution: 5°

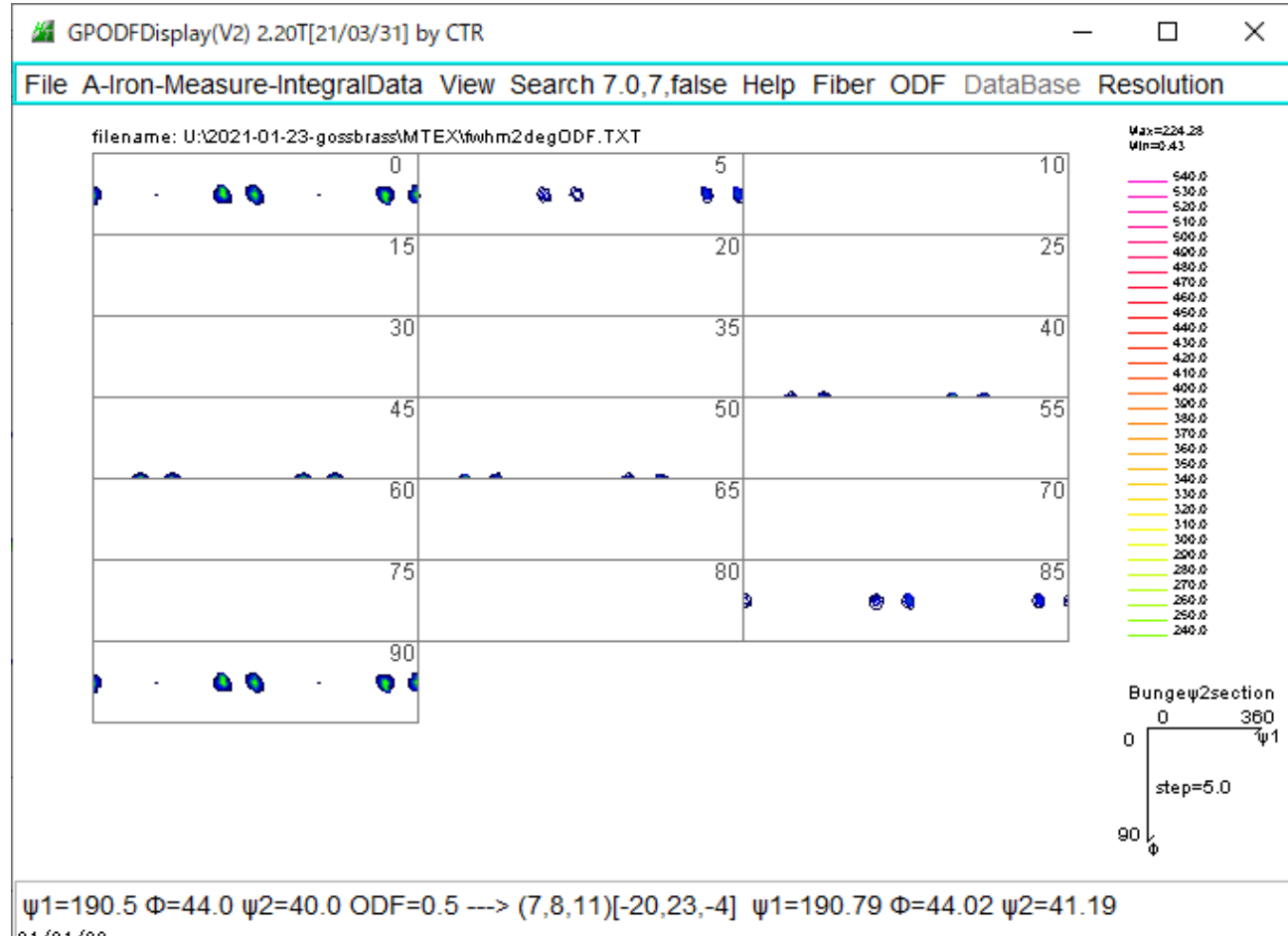
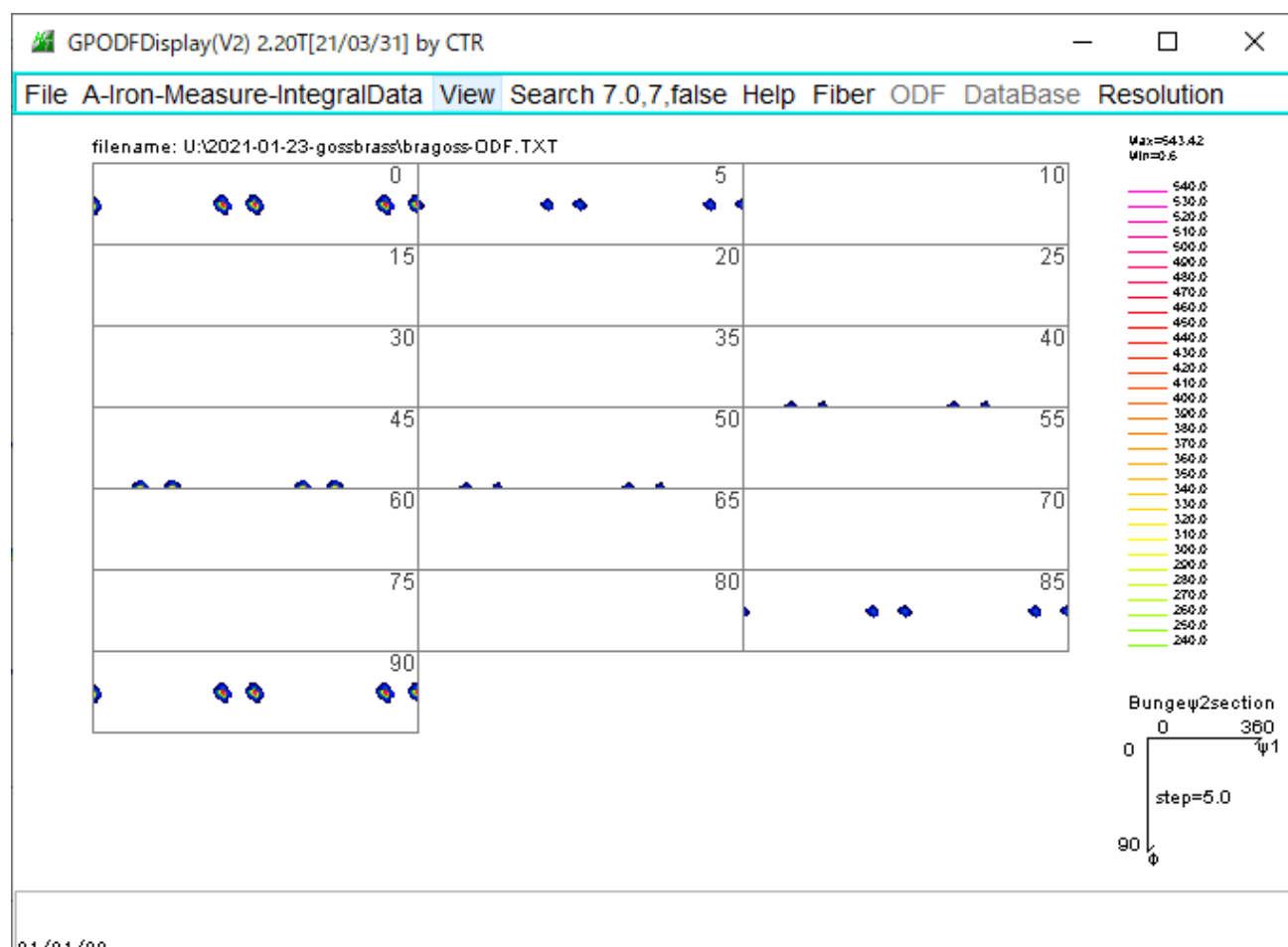
weight: 0.57223



目標値に近い値が得られる。

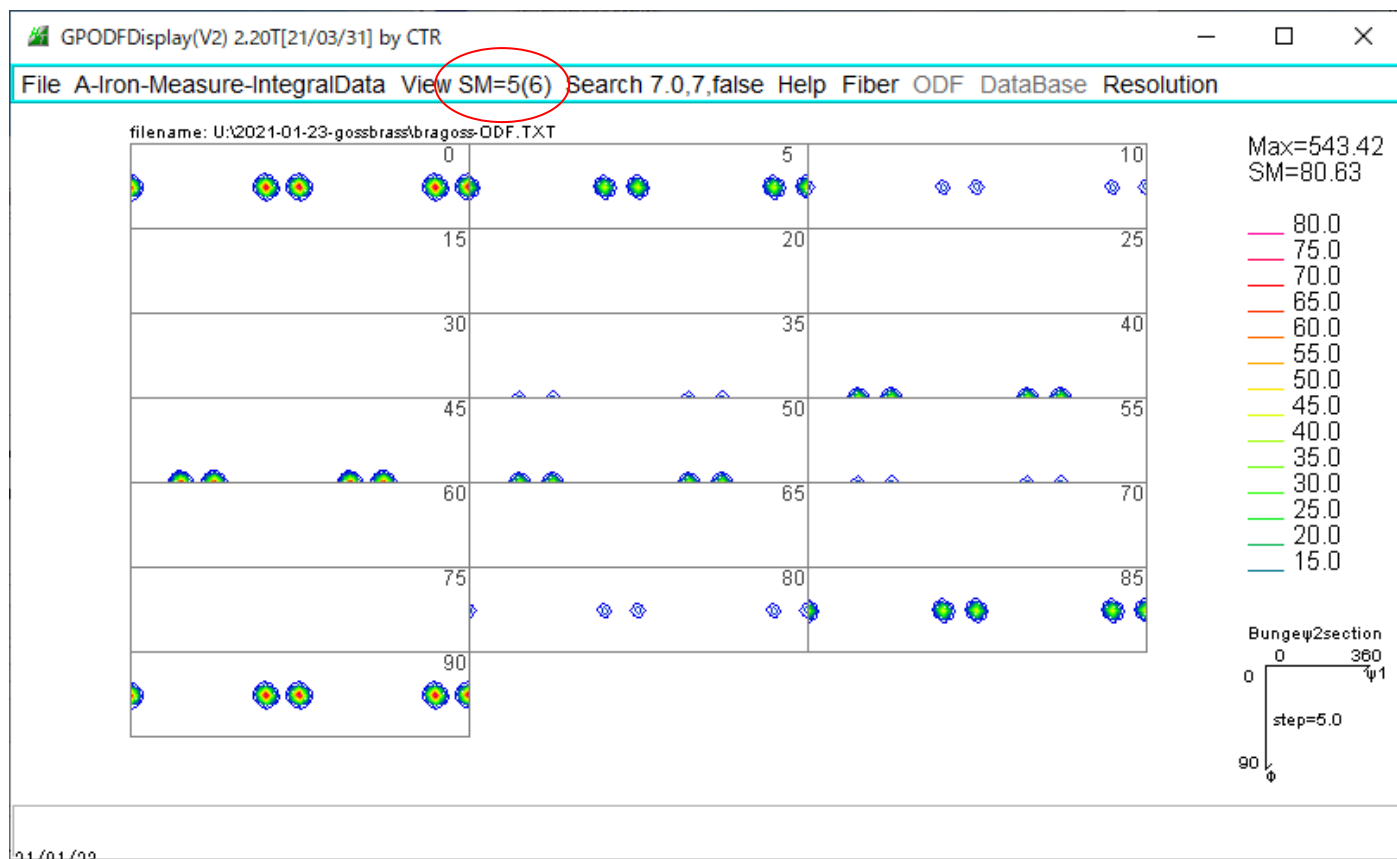
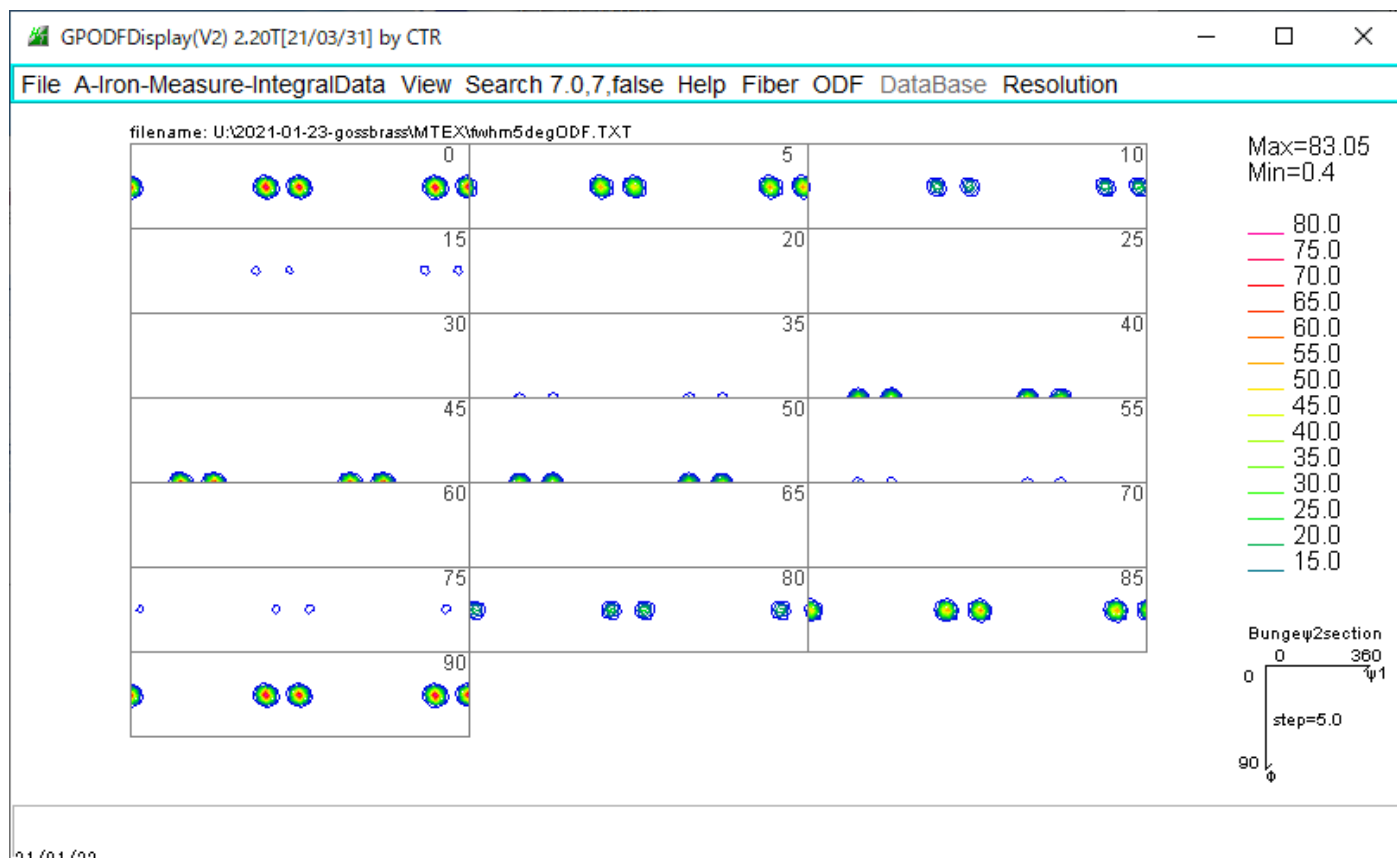
E B S Dと同じ $2 * d e g r e e$ である。

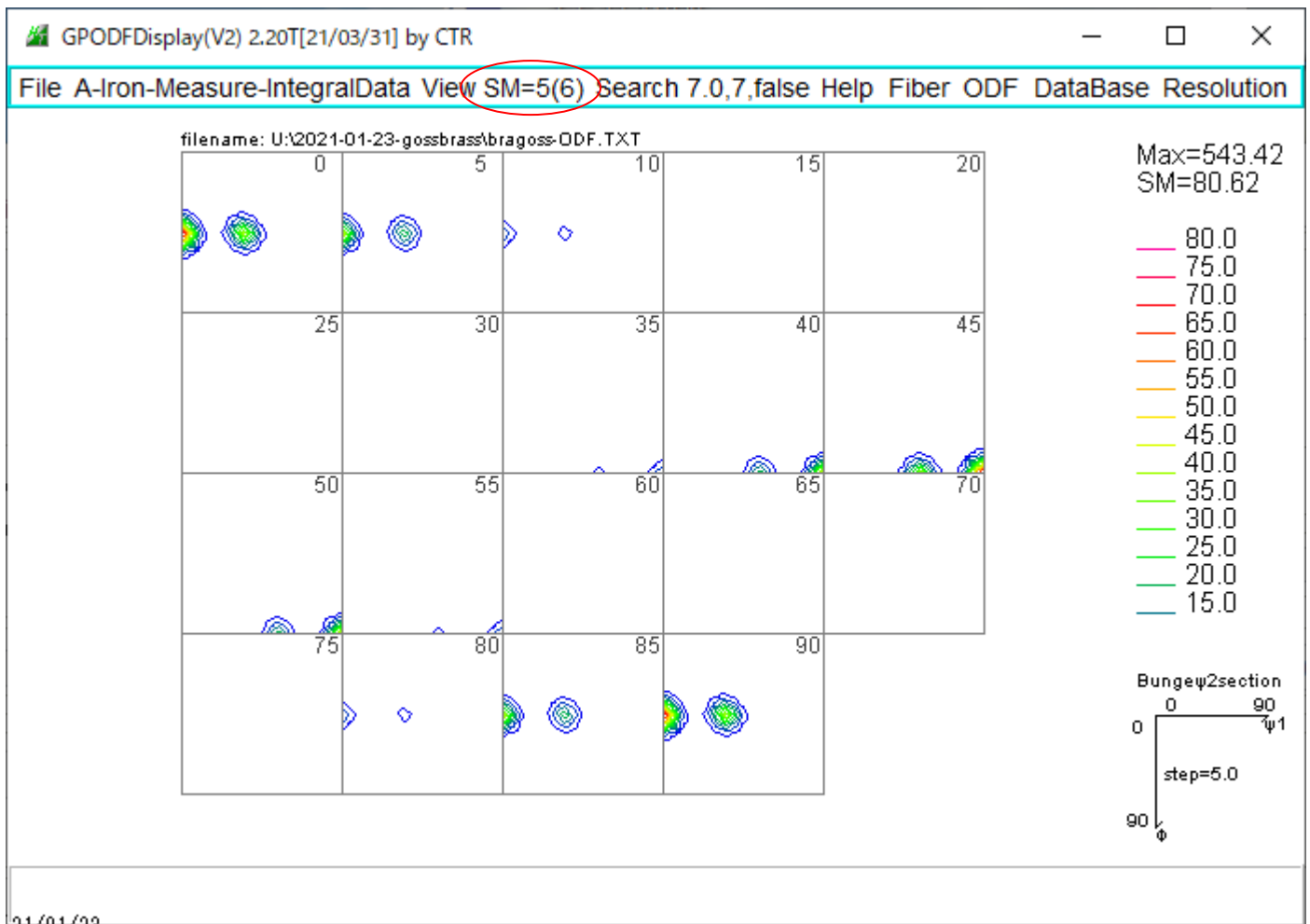
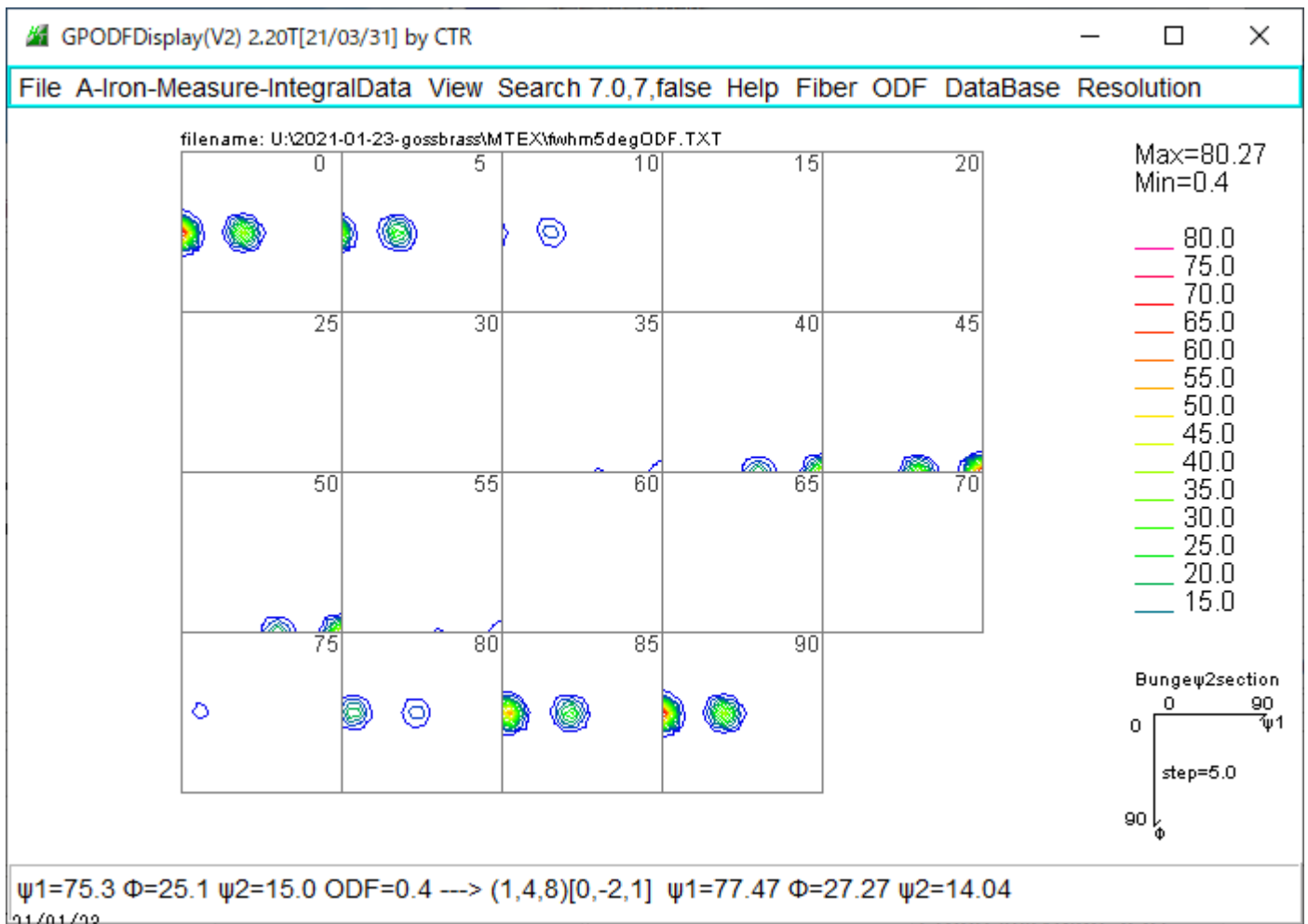
L a b o T e x (上段)、M T E X で比較 (下段)



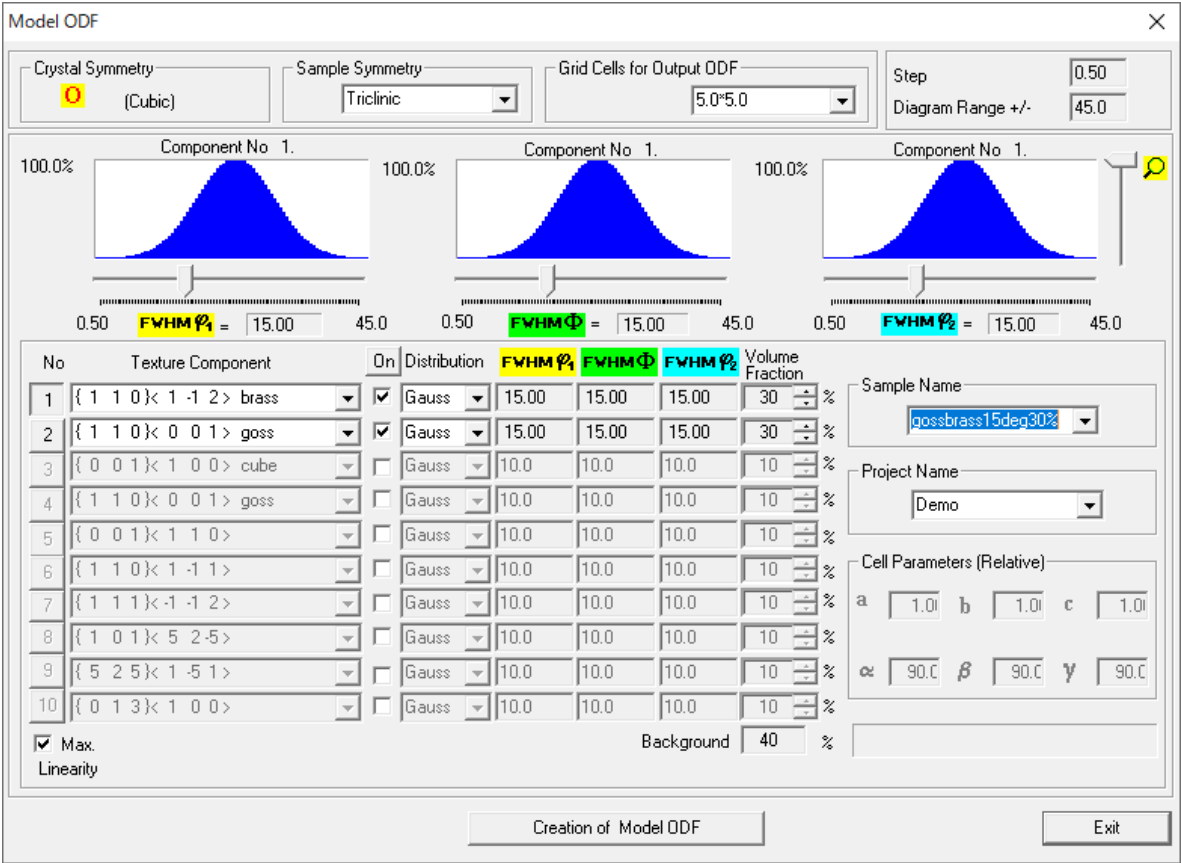
L a b o T e x と同一ODF図は f w h m = 2 d e g r e e で得られます。

逆にMTEXの $fwhm = 5\text{ deg}$ の方位密度をLaboTexに結果から得るには
 上段がMTEX、下段がLaboTexの平滑化5（6）

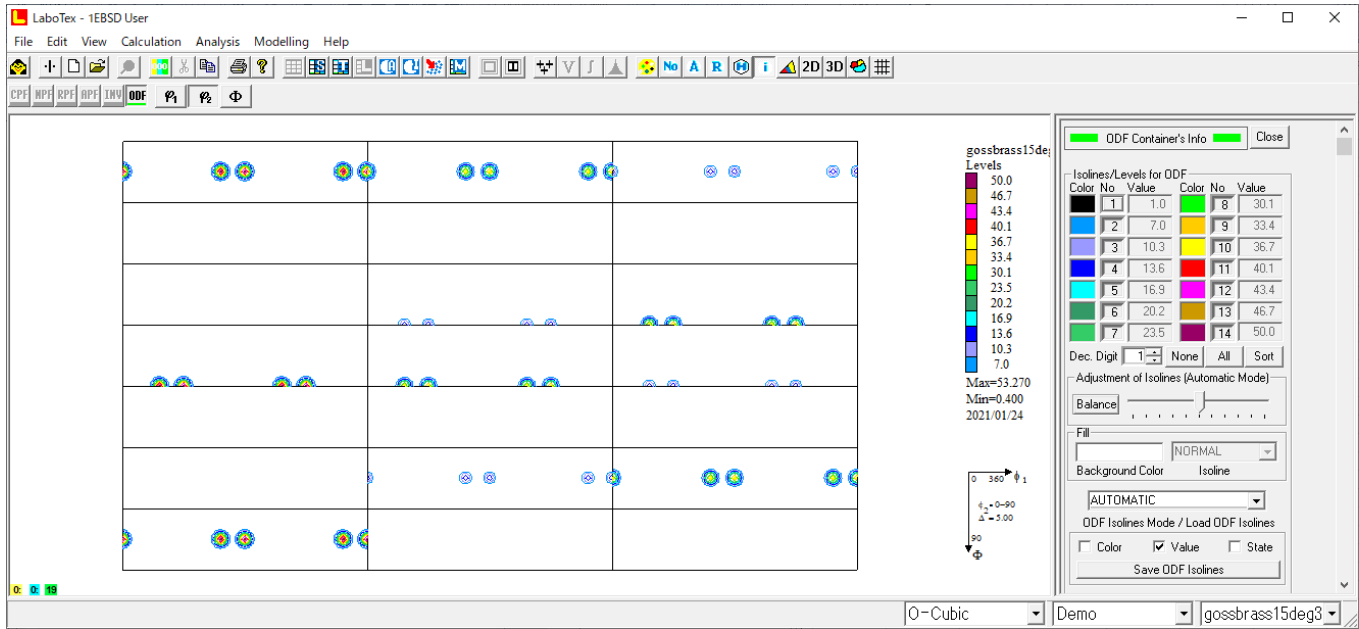




入力データ（半価幅15deg）



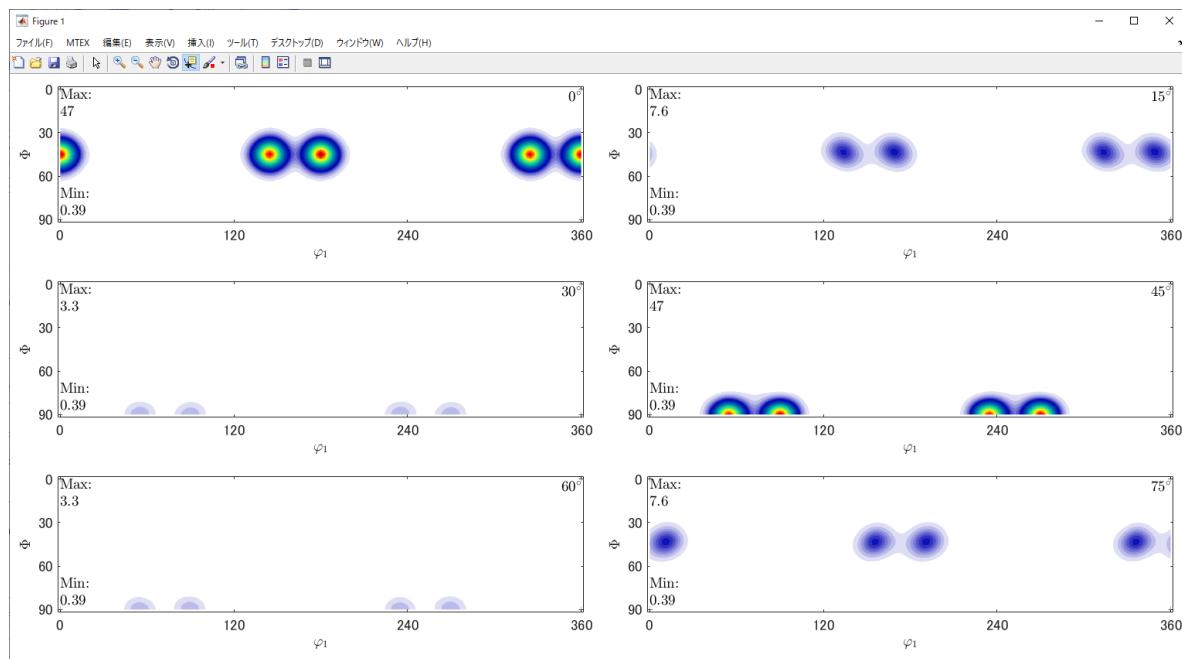
最大方位密度は53



MTEXでパラメータ無しのODF計算（5 d e gで計算される）

```
Radially symmetric portion:  
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°  
center: 4903 orientations, resolution: 5°  
weight: 0.61298
```

最大方位密度は47で計算される。



半価幅が広い XRD データの場合、デフォルトの f w h m = 5 d e g は適当と考えられる。