

G o s s , C o p p e r , S , r a n d o m 方位の挙動

2025年03月04日

*HelperTex Office*

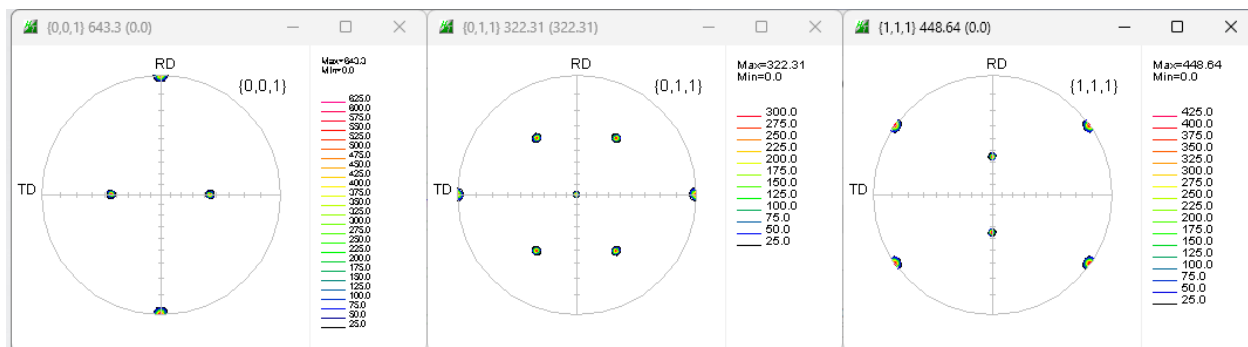
## 概要

極点図の測定間隔 (Step) と半価幅(FWHM)に関して調べ、Step幅より狭いFWHMの方位は実態を反映出来ていない事を説明した。

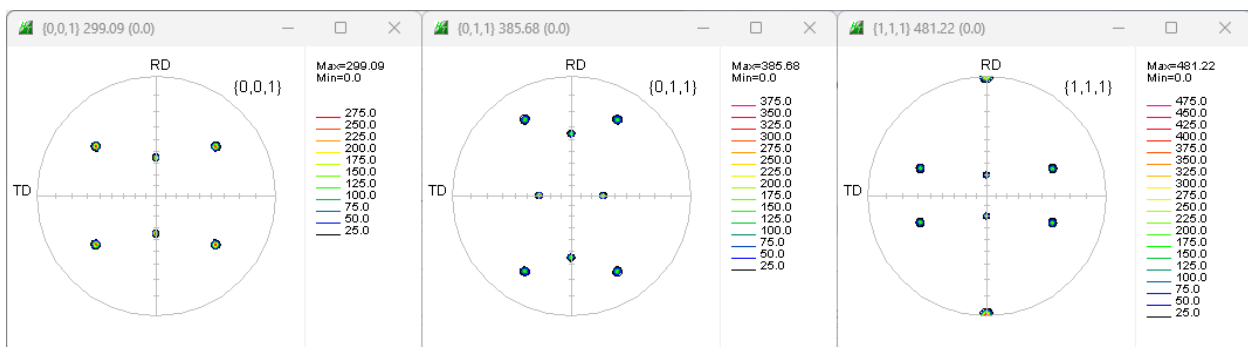
今回は、Goss, Copper, S, randomに関し、stepを1度、FWHMを3度とし、ODF解析後のVolume Fraction (VF%) を調べてみます。

極点図をCrystalOrientationDispで作成

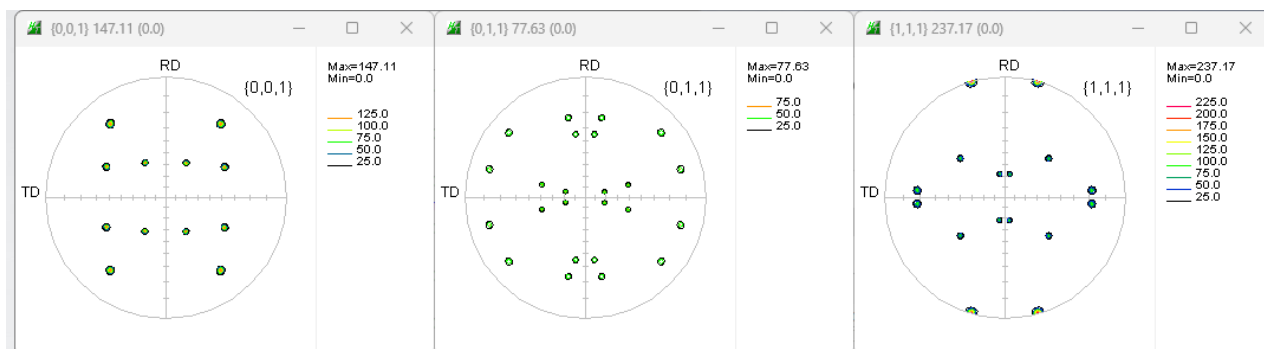
## Goss方位



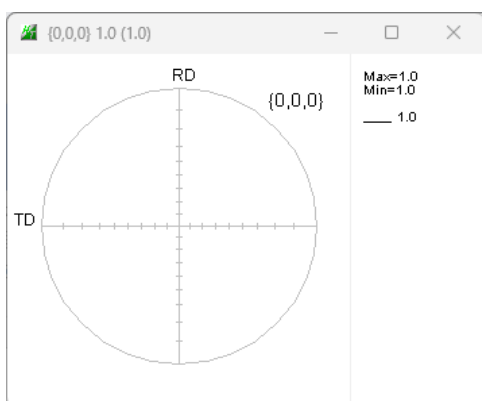
## Copper方位



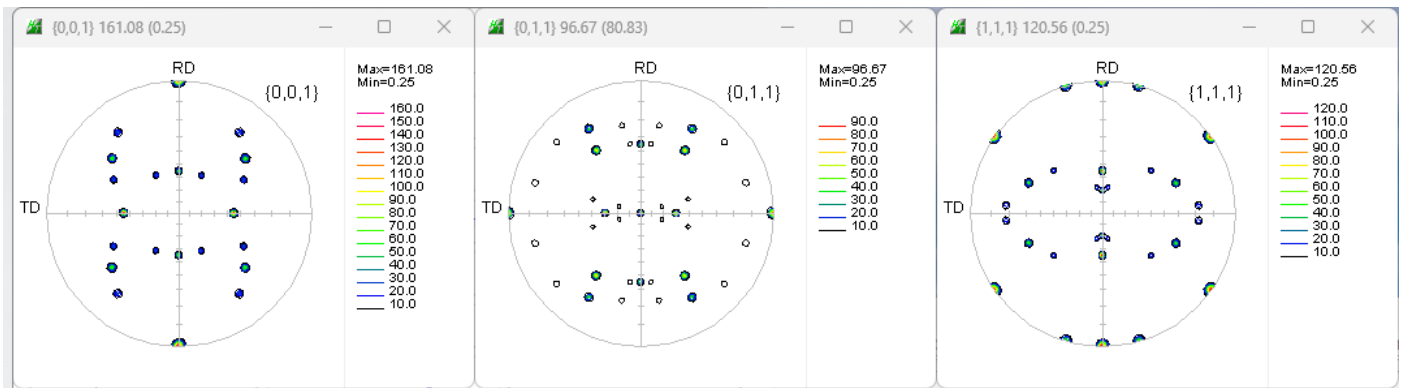
## S方位



## Random



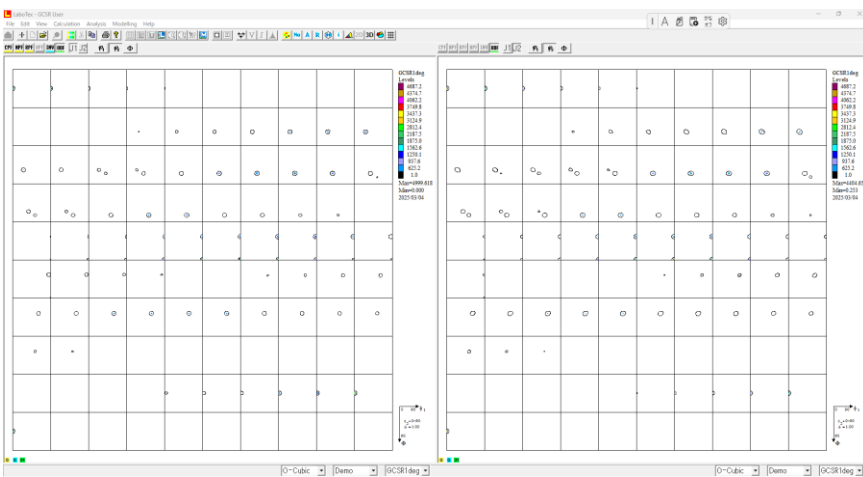
Step=1deg Goss+Copper+S+random



random=0.25 (25%) を示します。

極点図から計算したODF図

VolumeFraction 結果から計算した ODF 図



VolumeFraction 計算

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:GCSR1deg Job:1

Crystal Symmetry: (Cubic)    Sample Symmetry: Orthorhombic    Grid Cells for Output ODF: 1.0\*1.0    Step: 0.50    Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 1.    Component No. 1.    Component No. 1.

Misfit: Good    Backgr. Diff.

No	Texture Component	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\phi_2$	FWHM $\phi_3$	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	Gauss	3.1	3.0	3.0	21
2	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	Gauss	3.6	2.9	3.3	27
3	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	Gauss	3.6	3.1	3.5	27
4	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	Gauss	10.0	10.0	10.0	9
5	{ 2 3 1 } < -3 4 -6 > S-4	Gauss	10.0	10.0	10.0	8
6	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
7	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
8	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
9	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
10	{ 1 1 0 } < -1 -1 1 >	Gauss	10.0	10.0	10.0	10

Max. Linearity:     Orientation Set: Set from Database (sort by)    Save Current Set    Background: 25

Show Sym. Eq.    Calculation Mode: Automatic    Manual

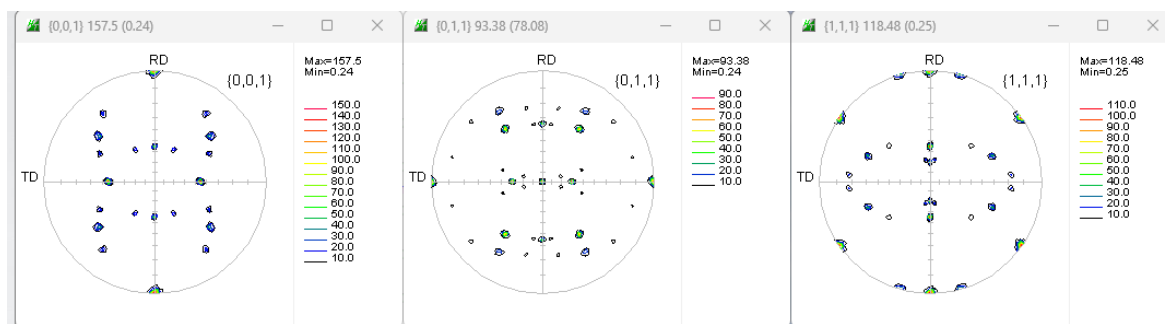
Max. Iteration Number: 1,000    Max. Fit Error % (\*1000): 100    Iteration: 934    Fit Error% (\*1000): 27778.

Fit Calculation Progress: [Progress Bar]

Change Initial Parameters    Fix Angles    Fix Fractions    Start Volume Fraction Calculation    View Report    Exit and Show    Exit

Goss : 21%、Copper : 27%、S : 27%、random : 25%を得る。

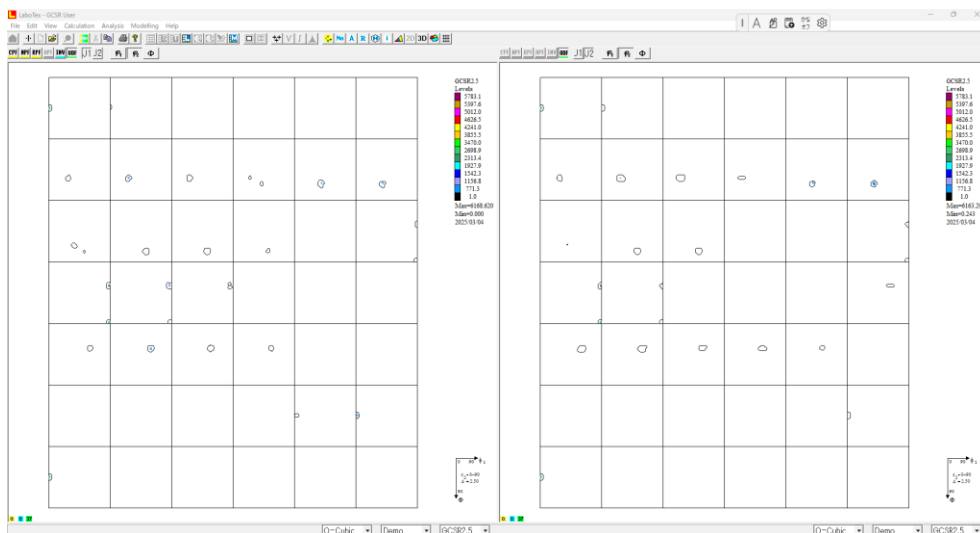
Step = 1 deg から Step 2. 5 deg 切り出し



Random が 24% から 25% を示す。

極点図から計算した ODF 図

VolumeFraction 結果から計算した ODF 図



VolumeFraction 計算

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:GCSR2.5 Job:1

Crystal Symmetry: **C** (Cubic)    Sample Symmetry: Orthorhombic    Grid Cells for Output ODF: 2.5\*2.5    Step: 0.50    Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 1.    Component No. 1.    Component No. 1.

Misfit: Good    Backgr.    Diff.

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\phi_2$	FWHM $\phi_3$	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	2.1	2.3	2.3	22
2	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	1.5	1.6	1.5	30
3	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	2.2	2.3	1.0	24
4	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	6
5	{ 2 3 1 } < -3 4 -6 > S-4	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	6
6	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	5
7	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
8	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
9	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10
10	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10

Max. Linearity:     Orientation Set: Set from Database (sort by)    Save Current Set    Background: 24

Show Sym. Eq.    Calculation Mode:  Automatic     Manual

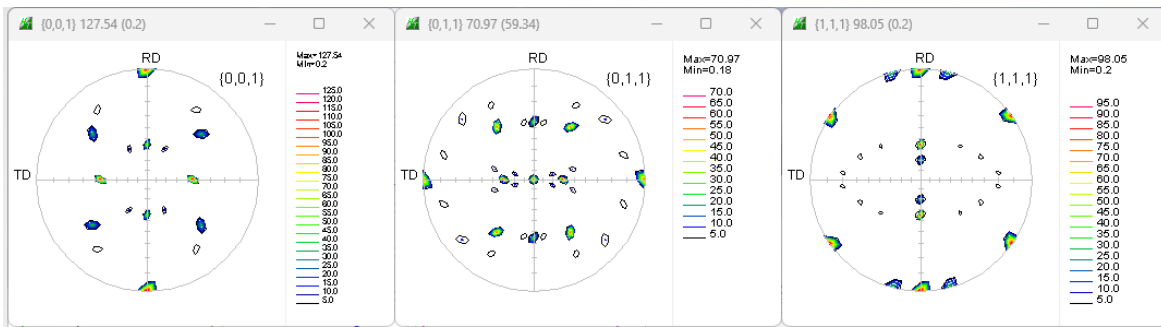
Max. Iteration Number: 1,000    Max. Fit Error% (\*1000): 100    Iteration: 333    Fit Error% (\*1000): 28311.

Fit Calculation Progress:

Change Initial Parameters    Fix Angles    Fix Fractions    Start Volume Fraction Calculation    View Report    Exit and Show    Exit

Goss : 22%、Copper : 30%、S : 24%、random : 24% を得る。

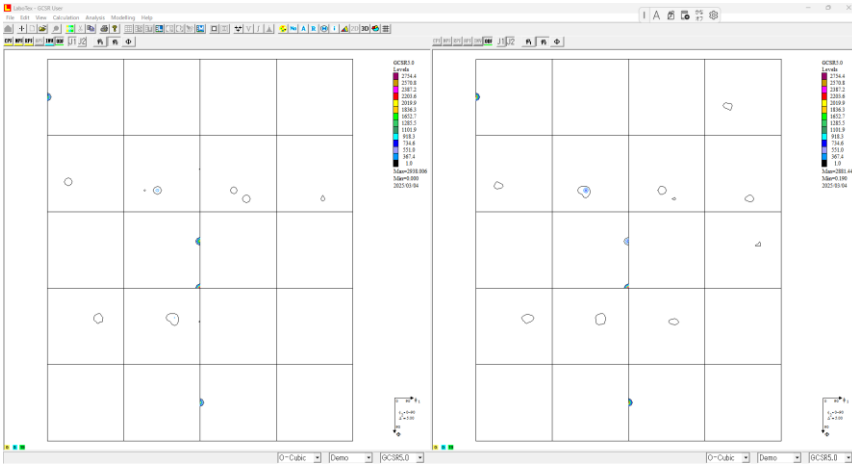
Step = 1 deg から Step 5 deg 切り出し



Random が 18% から 20% を示す。

極点図から計算した ODF 図

VolumeFraction 結果から計算した ODF 図



VolumeFraction 計算

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:GCSR5.0 Job:1

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

Component No. 6.    Component No. 6.    Component No. 6.

Misfit: Good    Background: Diff.

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi$	FWHM $\Phi$	FWHM $\phi_2$	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	1.6	1.8	1.3	47 %
2	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	1.8	1.4	1.6	33 %
3	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	4.2	5.7	5.4	1 %
4	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	4.2	6.4	6.0	0 %
5	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	3.8	5.9	4.6	0 %
6	{ 2 3 1 } < -3 4 6 > S-4	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	4.1	3.8	7.2	0 %
7	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 1 0 1 } < 5 2 5 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Max. Linearity:     Orientation Set: Set from Database (sort by)    Save Current Set    Background: 19 %

Calculation Mode:  Automatic     Manual

Max. Iteration Number: 1,000    Max. Fit Error % (\*1000): 100

Iteration: 268    Fit Error% (\*1000): 40243

Fit Calculation Progress:

Change Initial Parameters    Fix Angles    Fix Fractions    Start Volume Fraction Calculation    View Report    Exit and Show    Exit

Goss : 47%、Copper : 33%、S : 1%、random : 19% を得る。

## まとめ

前回確認した Step 幅より狭い FWHM の方位は実態を反映出来ていない事が確認できる。

FWHM = 3 deg の場合、Step 幅による VF % 結果

Step	1	2.5	5
Goss	21	22	47
Copper	27	30	33
S	27	24	1
random	25	24	19

S 方位に関しては

Approx. Miller Indices	Euler Angles
[ 1 3 2 ] [ 6 -4 3 ]	[ 27.03, 57.69, 18.43 ]
[ 2 1 3 ] [ -3 -6 4 ]	[ 58.98, 36.70, 63.43 ]
[ 2 3 1 ] [ 3 -4 6 ]	[ 52.87, 74.50, 33.69 ]

euler 角度が極点測定値の碁盤の目から外れているため、FWHM 3 deg では Step 幅を大きくすると検出出来なくなっている。

ODF から定量的な値を求める場合、ソフトウェアの限界確認が重要です。