MTEXによるcubeとstepよる配向関数の影響

2025年08月01日

HelperTex Office

概要

ODF解析を行ったcubeの(100)極点図の中心と外周で方位密度が異なるケースある。
MTEXにて(100)を作成し確認する。(100)は他の(110)、(111)より難しい。

```
CS= crystalSymmetry('cubic')
```

```
SS = specimenSymmetry('1')
```

```
Ori1 = orientation.byMiller([1 0 0],[0 0 1],CS)
```

```
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)
```

```
odf=unimodalODF(Ori1,psi)
```

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

```
k = 0.3333
```

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

```
k = 0.3333
```

```
k=calcKearnsFactor(odf,yvector)
```

```
k = 0.3333
```

```
h = {Miller(1,1,1,CS),Miller(2,0,0,CS),Miller(2,2,0,CS)}
```

```
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

(200) 極図形

0.0	0.0	60.56463↓
0.0	5.0	30.368053↓
0.0	10.0	3.8335821↓
0.0	15.0	0.11631387↓
0.0	20.0	0.0022010606↓
0.0	25.0	0.0067980868↓
85.0	335.0	30.36452↓
85.0	340.0	30.36553↓
85.0	345.0	30.366507↓
85.0	350.0	30.367322↓
85.0	355.0	30.367864↓
85.0	360.0	30.368053↓
90.0	0.0	60.56463↓
90.0	5.0	60.56463↓
90.0	10.0	60.56463↓
90.0	15.0	60.56463↓
90.0	20.0	60.56463↓
90.0	25.0	60.56463↓
90.0	30.0	60.56463↓

同一である。

中心から5 deg では若干の乱れがある。

Export 極点図ら配向関数の計算

0.333は得られない

Exportされた極点図を再度MTEXに読み込みkearnsFactor計算
`k=calcKearnsFactor(odf,zvector)`

`k = 0.3333`

が得られる

この事から、MTEXのkearnsFactorはODF解析結果から計算され、
CTRでは5degステップで作成された極点図の違いと考えられる。

CTRソフトウェアによる極点図生成では、(100)の極点図中心と外周では強度は同一である。

CrystalOrientationDispソフトウェア

1deg, 2.5deg, 5deg極点図を生成し比較する

CTRソフトウェアCrystalOrientationDispにてstep間隔の評価
1degStep

5degstep

2. 5 s t e p

まとめ

	ND	RD	TD
1deg	0.3333	0.3335	0.3335
2.5deg	0.3309	0.3345	0.3345
5deg	0.3235	0.3383	0.3383

c u b e (1 0 0) 極点図中心と外周の方位密度は同一である。

極点図から配向評価を行う場合、測定 S t e p 間隔により影響を受けます。

精密な計算が必要な場合、s t e p 間隔を狭くする事

改良CTR (2025/08/05)

1 d e g

2. 5 d e g

5 d e g

CTRソフトウェアによるcube (100)

0.0	0.0	56.08073897291165↓
0.0	5.0	28.07138969293591↓
0.0	10.0	3.5205820455660053↓
0.0	15.0	0.11062808570528415↓
0.0	20.0	8.709970743257534E-4↓
0.0	25.0	1.7181788391593986E-6↓
0.0	30.0	8.492203778079203E-10↓
0.0	35.0	1.0516538567603303E-13↓

85.0	320.0	28.07138969293572↓
85.0	325.0	28.07138969293572↓
85.0	330.0	28.07138969293572↓
85.0	335.0	28.07138969293572↓
85.0	340.0	28.07138969293572↓
85.0	345.0	28.07138969293572↓
85.0	350.0	28.07138969293572↓
85.0	355.0	28.07138969293572↓
85.0	360.0	28.07138969293572↓

90.0	0.0	56.08073897291165↓
90.0	5.0	56.08073897291165↓
90.0	10.0	56.08073897291165↓
90.0	15.0	56.08073897291165↓
90.0	20.0	56.08073897291165↓
90.0	25.0	56.08073897291165↓
90.0	30.0	56.08073897291165↓
90.0	35.0	56.08073897291165↓
90.0	40.0	56.08073897291165↓
90.0	45.0	56.08073897291165↓
90.0	50.0	56.08073897291165↓

CTRソフトウェアによる極点図生成は
 指定したFWHMの g a u s s 関数を極点図中心に生成し、
 他の方位は、指数から計算された (α 、 β) 角度に中心極点図を回転し、加算している。

5 deg 間隔の (1 1 0)

5 deg 間隔の (1 1 1)