

HexagonalにおけるNewODF挙動調査

2025年03月06日

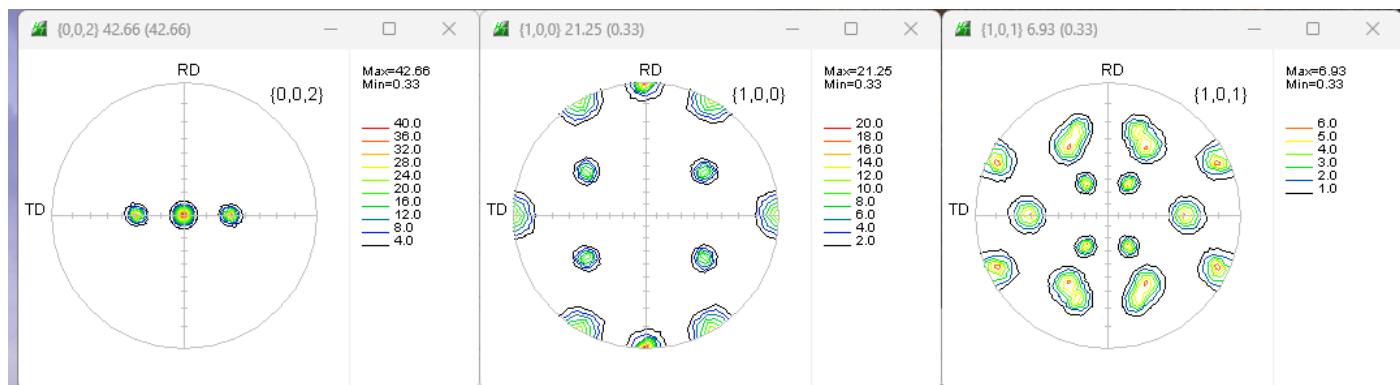
HelperTex Office

概要

前回 [Hexagonal材料のODF解析の注意点] で (001) $[100]$ の ValueFraction 計算にて、良い結果が得られなかったので、追加調査をおこなう。

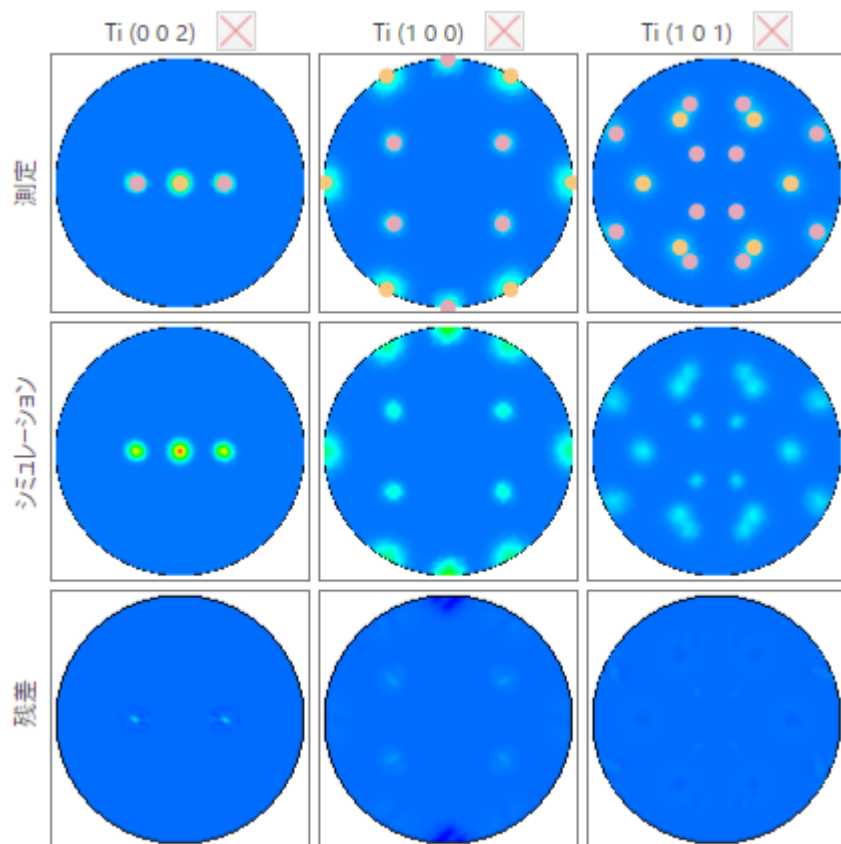
$\{001\} \langle 100 \rangle$ FWHM10deg、 $\{114\} \langle 1-10 \rangle$ FWHM6degと random を33%で加算した極点図の VolumeFraction 計算を行う。

入力データ



Mini=0.33 → random=33%

NewODFに読み込む



計算方式: で指定

ODFを計算

ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式:

試料の対称性:

α 解析開始角度(°):

α 解析終了角度(°):

ODFグリッド

φ_1 ステップ(°):

Φ ステップ(°):

φ_2 ステップ(°):

パラメータ

結晶相: ODFをシミュレート

最小化アルゴリズム:

母集団: 個体数: ターゲット χ^2 :

重み: クロスオーバー:

RP因子=9.26 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算

コンポーネント定義

ランダム分率: 最小: 最大: フィッティング:

体積分率 (%): 35.24

コンポーネント

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	.	Basal-A		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	31.63
2	.	TD-split		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 1 4)[1 -1 0]	33.13

コンポーネントプロパティ

パラメータ	値	最小	最大	フィッティング
分率	0.33	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	9.29	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ_1 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	38.51	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ_2 (°)	30.00	0.00	60.00	<input type="checkbox"/>

良い結果が得られる。

単独のBasalはFitting不良であるが

Basal+TD-SplitならFittingが行える。

同一データをL a b o T e xで計算

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:2PR Job:1

Crystal Symmetry: D_6 (Hexagonal) | Sample Symmetry: Orthorhombic | Grid Cells for Output ODF: 5.0*5.0 | Step: 0.50 | Diagram Range +/-: 45.0

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM Φ_1	FWHM Φ_2	FWHM Φ_3	Volume Fraction
1	{ 0 0 1 } < 1 0 0 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	9.4	11.1	9.3	34
2	{ 1 1 4 } < 1 -1 0 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	5.7	8.5	10.0	30
3	{ 0 0 1 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	14
4	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	16
5	{ -1 2 5 } < 2 1 0 > -125210	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	11
6	{ -1 2 5 } < 2 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	12
7	{ 1 1 5 } < 1 -1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	14
8	{ -1 2 5 } < 2 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	17
9	{ 0 0 2 } < 8 7 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	13
10	{ -1 2 4 } < 2 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	13

Max. Linearity: | Orientation Set: Set from Database (sort by) | Save Current Set | Background: 36

Show Sym. Eq: { 0 0 1 } < 1 0 0 >

Calculation Mode: Automatic Manual

Max. Iteration Number: 1,000 | Max. Fit Error % (*1000): 100 | Iteration: 195 | Fit Error% (*1000): 14803

Fit Calculation Progress:

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

No.	VF (%)	Phi1 (FWHM)	Phi (FWHM)	Phi2 (FWHM)	Orientation
1:	34.34	9.4	11.1	9.3	{ 0 0 1 } < 1 0 0 >
2:	30.08	5.7	8.5	10.0	{ 1 1 4 } < 1 -1 0 >
3:	35.58	Background Volume Fraction			