

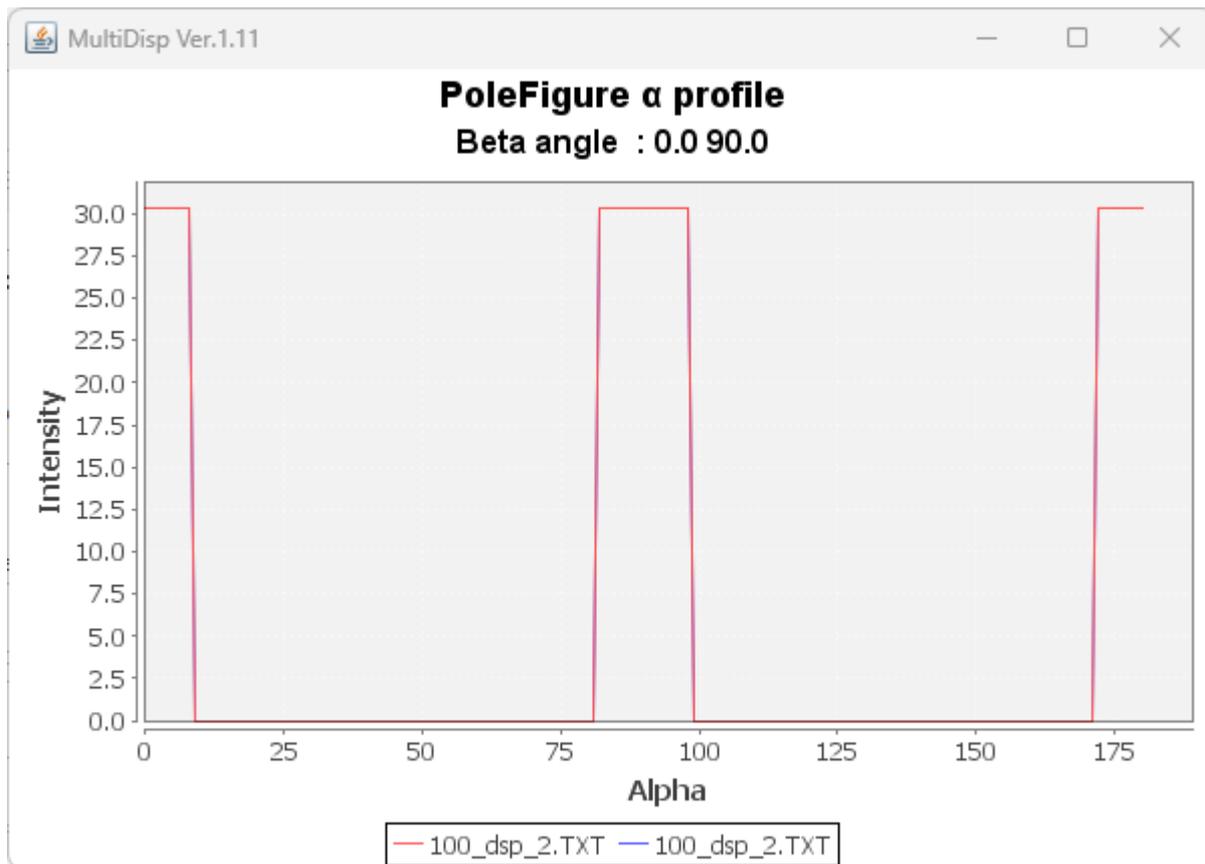
ODFの体積分率 (Volume Fraction) におけるBOX定量評価

20025年03月30日

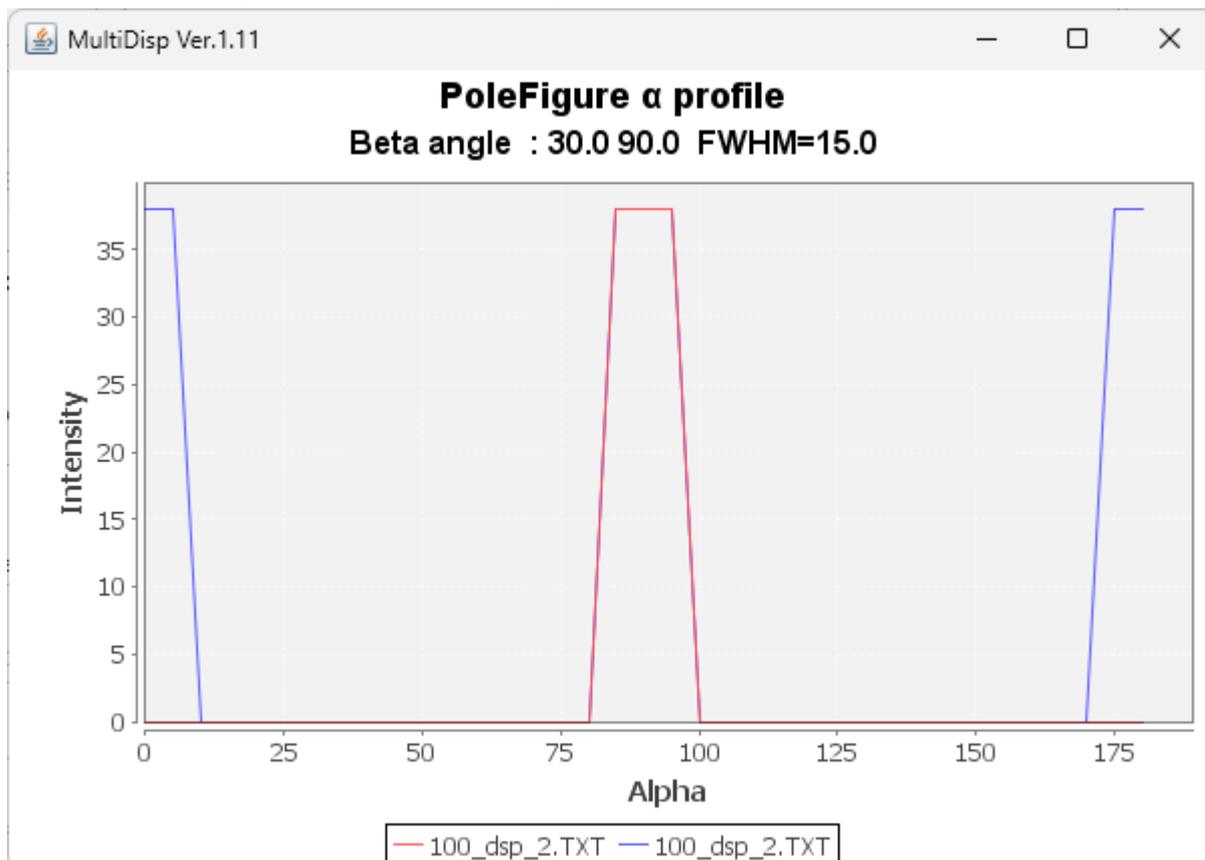
HelperTex Office

概要

ODF解析時、体積分率の計算でプロファイル関数ではなくBOX内の定量が行われている。
以下のプロファイル (fwhm=10deg) を作成し評価してみます。Gretio=2.0
step=1.0deg Grestio=2でBOXプロファイルが作成される。



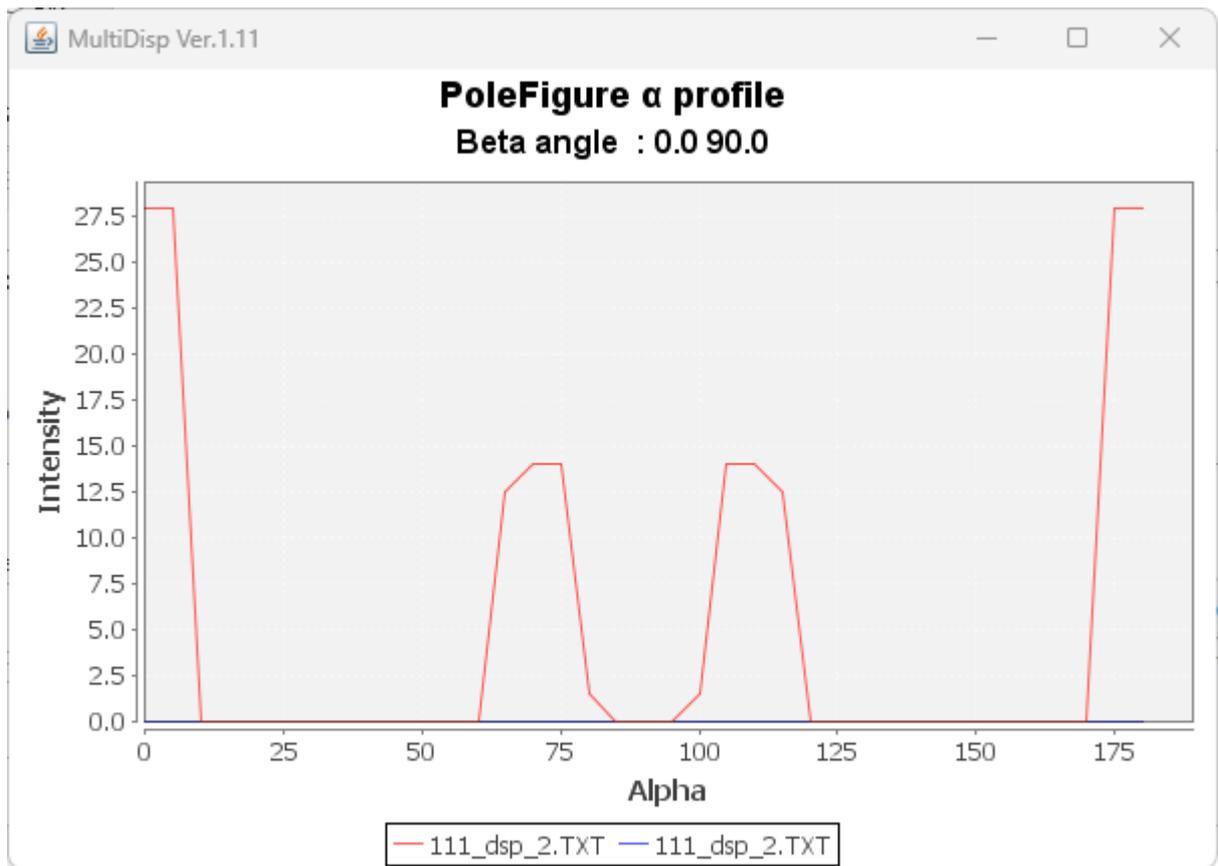
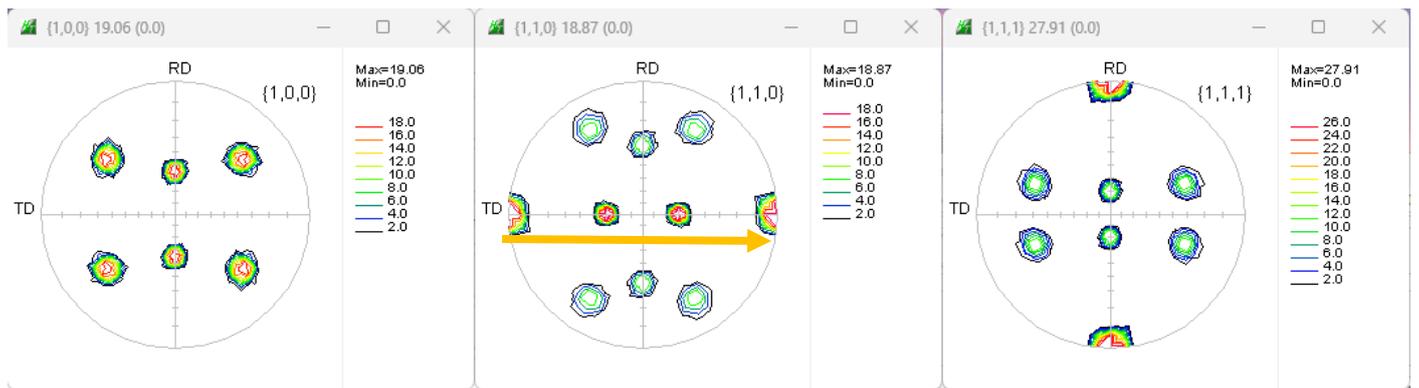
Step=5deg (fwhm=10degで作成)



fwhm=15degですそ野は±10degに広がる。

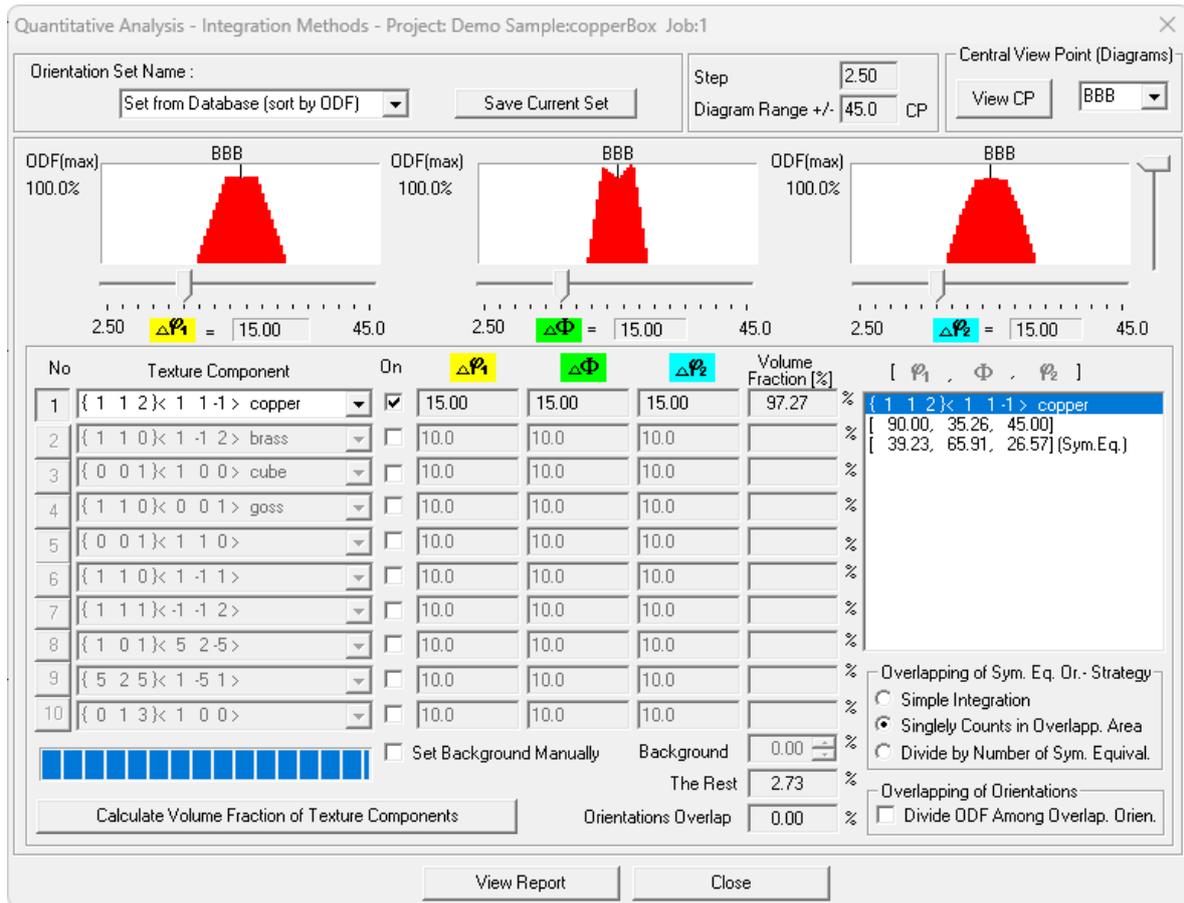
評価する極点図

copper、fwhm=10deg、step=5deg

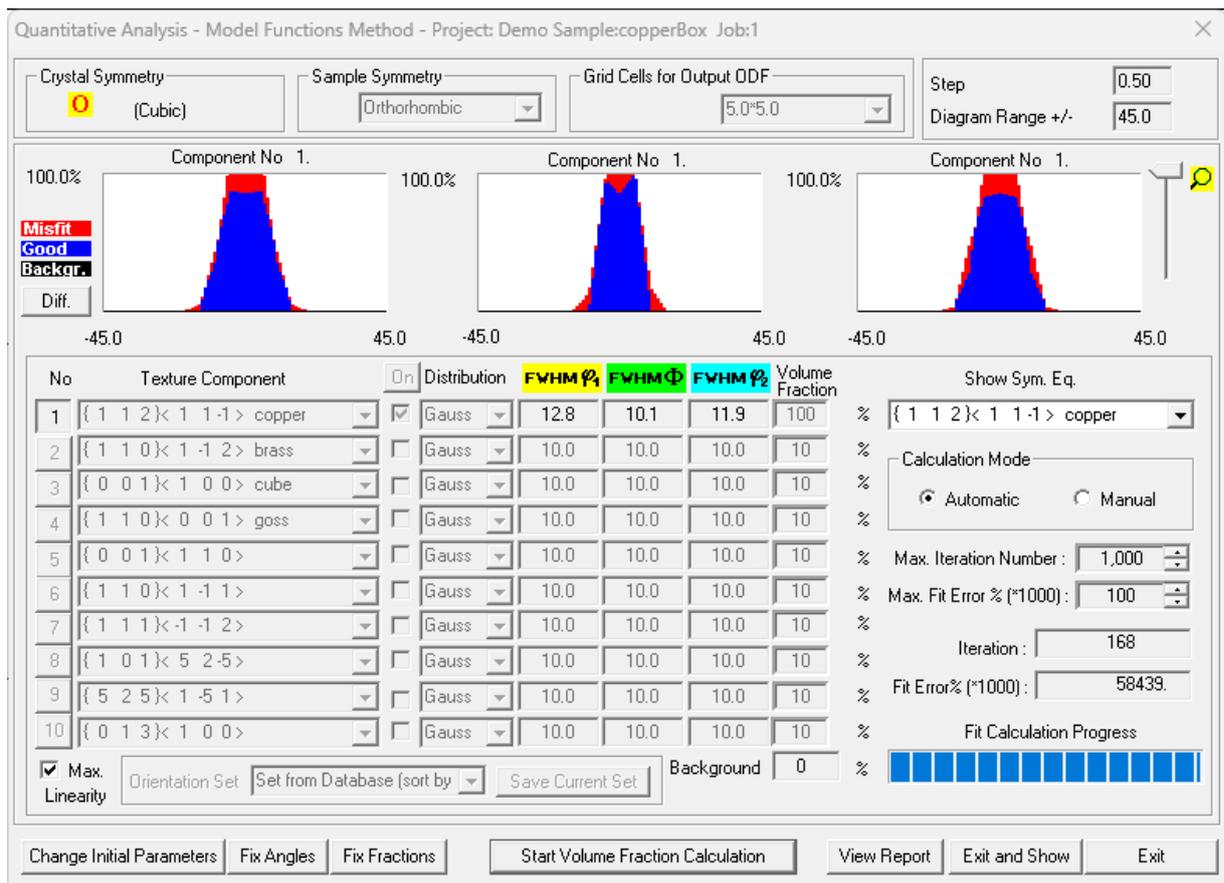


LaboTexによる評価

Box評価



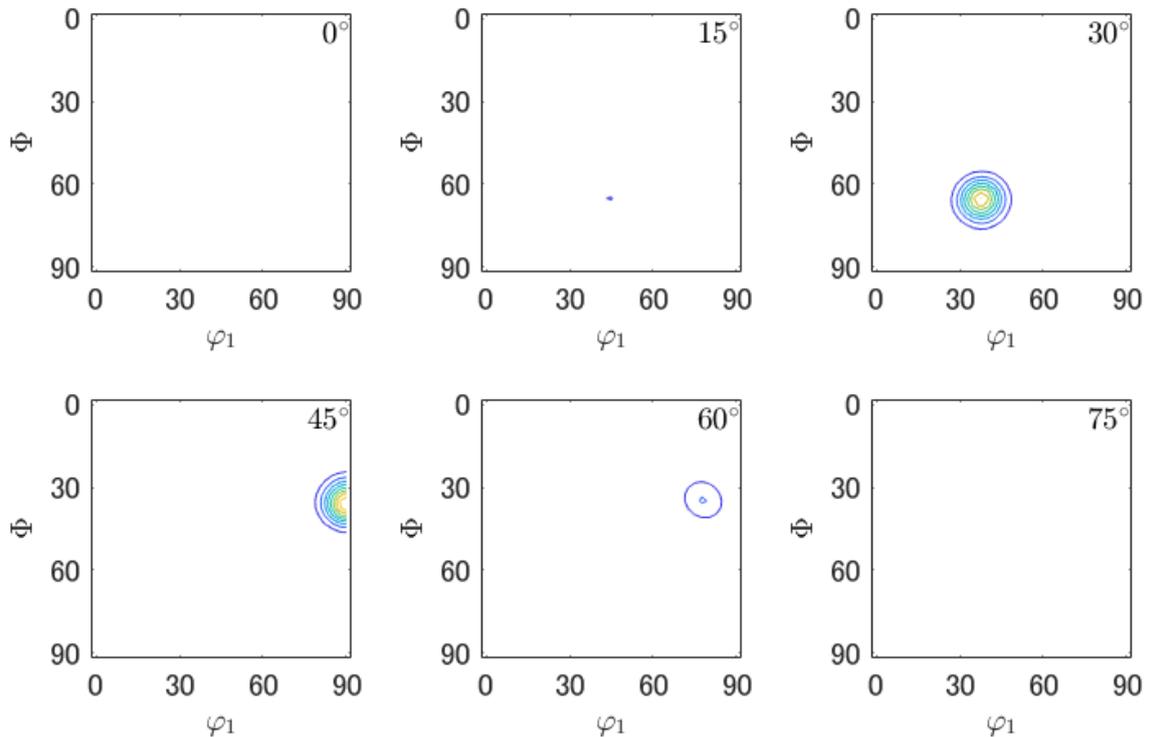
Gauss評価



Gauss関数で対応出来ている。

MT E X評価

```
A S Cデータを import
//XRD データをO r t h o r h o m b i cで解析
SS= specimenSymmetry('orthorhombic')
copper= orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS、 SS)
pf = PoleFigure.load(fname,h,CS,SS,'interface','xrd');
odf=calcODF(pf)
```



```
[value,ori]=max(odf,'numLocal',5)
value = 140.8756 79.8301 0.1244 0.0764 0.0241
```

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

size: 1 x 5

Bunge Euler angles in degree

phi1	Phi	phi2	Inv.
90.1462	36.12	224.906	0
139.783	60.3725	244.607	0
163.205	47.6531	204.157	0
140.184	19.6536	206.806	0
160.618	26.1604	161.847	0

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

progress: 100%

ans = 0.9384

体積分率 93.8%を得る

注意: T r i c l i n i cで解析を行うと体積分率は半分に計算される。

X R Dの測定ではo r t h o r h o m b i cで測定されている。

パラメータ

結晶相: Al

最小化アルゴリズム: 遺伝的アルゴリズム

母集団: 50 個体数: 100 ターゲット χ^2 : 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

RP因子=23.71 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

ランダムの方率 0.00 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 0.00

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	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	100.00

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	1.00	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	10.73	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ_1 (°)	39.23	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	65.91	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ_2 (°)	26.56	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

パラメータ

結晶相: Al

最小化アルゴリズム: 遺伝的アルゴリズム

母集団: 50 個体数: 100 ターゲット χ^2 : 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

RP因子=22.79 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

ランダムの方率 0.00 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 0.00

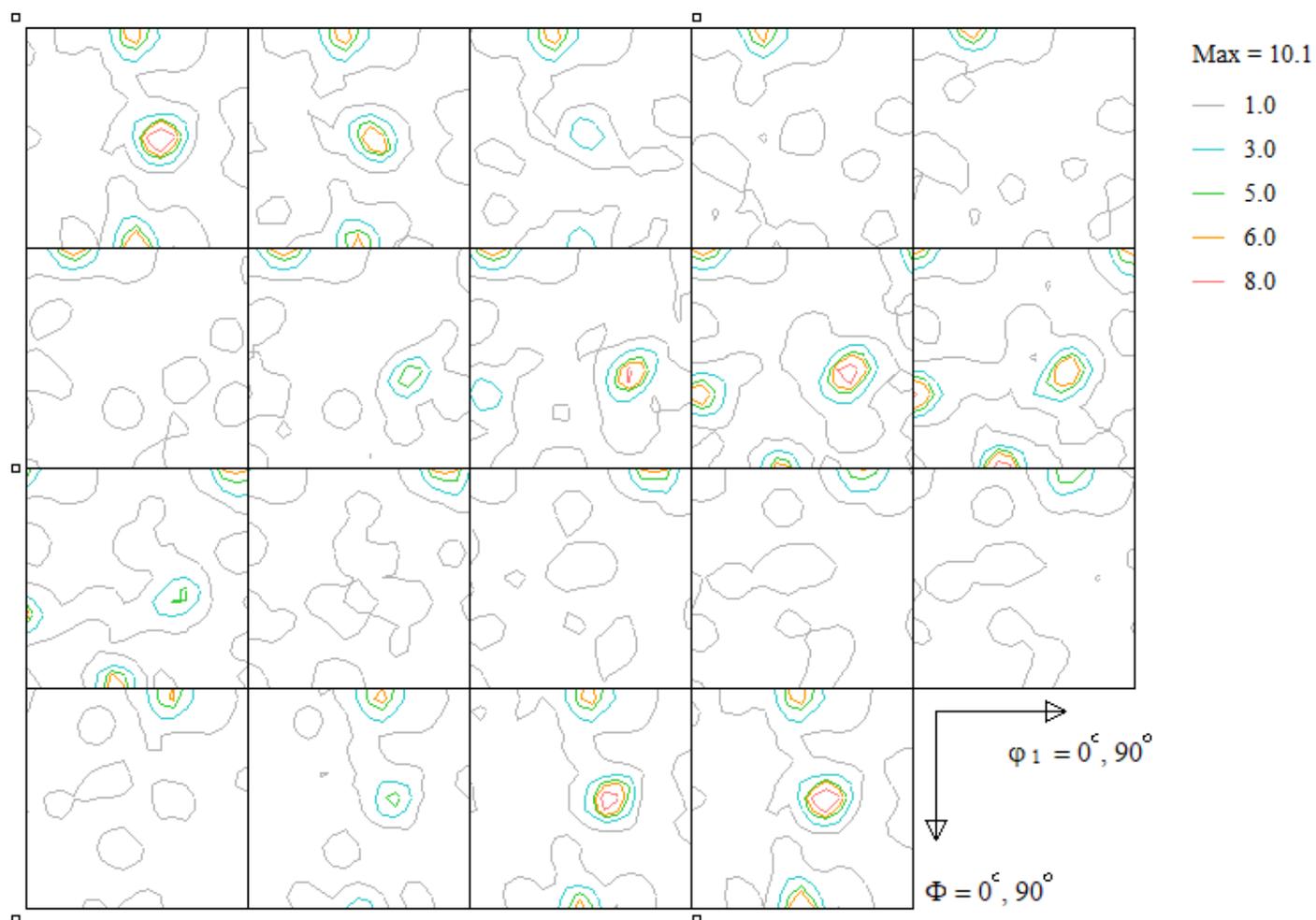
コンポーネント

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
▶ 1	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	100.00

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	1.00	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	10.50	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ_1 (°)	37.41	0.00	90.00	<input checked="" type="checkbox"/>
Φ (°)	66.13	0.00	90.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ_2 (°)	26.41	0.00	90.00	<input checked="" type="checkbox"/>

分率=1.0で対応できている。



ODF 解析に失敗している

まとめ

MTEXでは読み込み時の状態ではTriclinicで処理される。

SS= specimenSymmetry('orthorhombic')

でOrthorhombic化が重要