

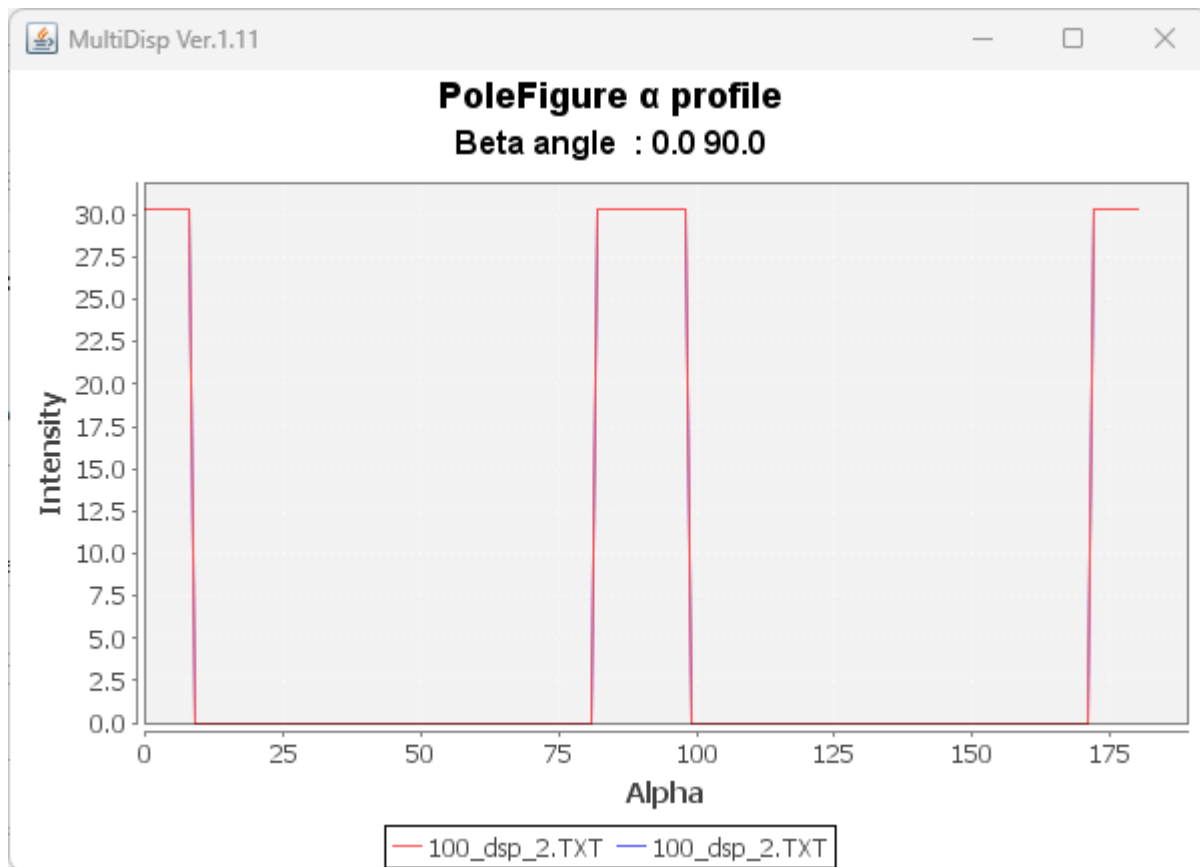
ODFの体積分率 (Volume Fraction) におけるBOX定量評価

20025年03月30日

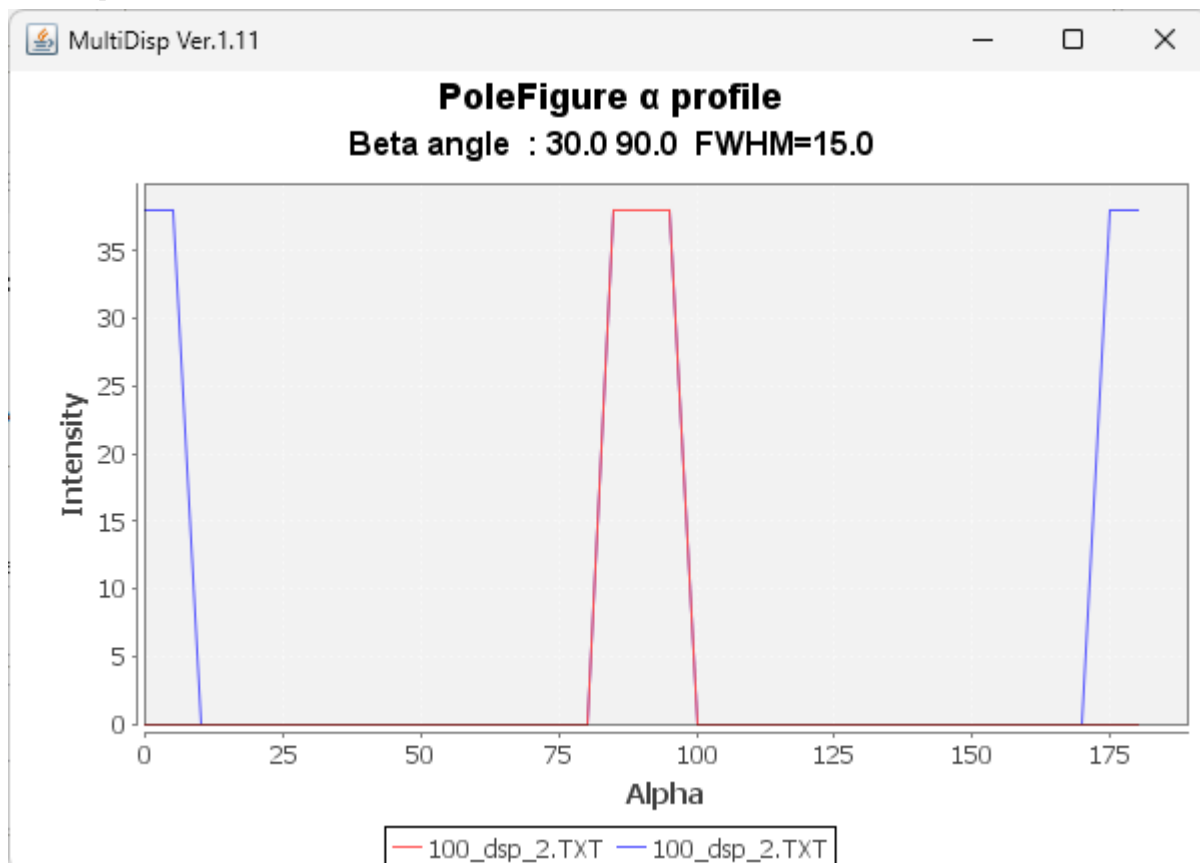
HelperTex Office

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。



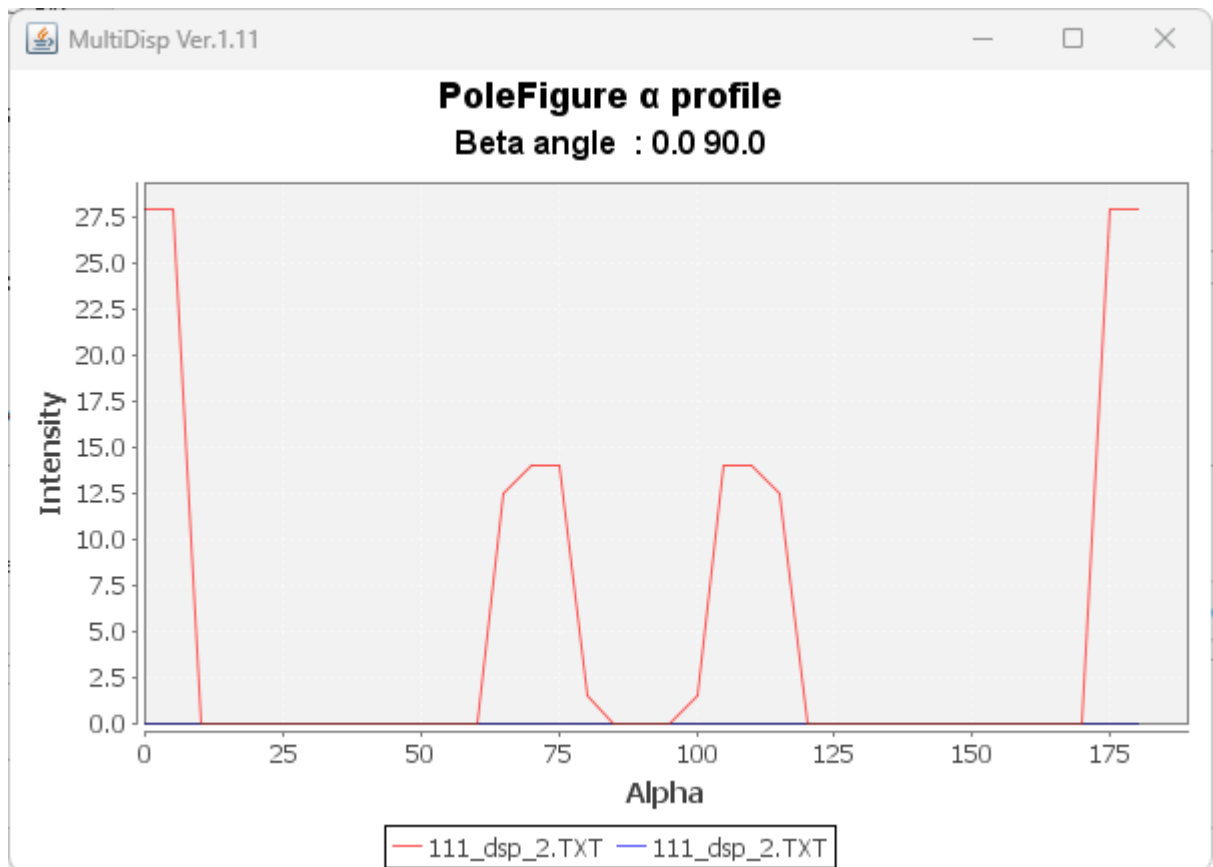
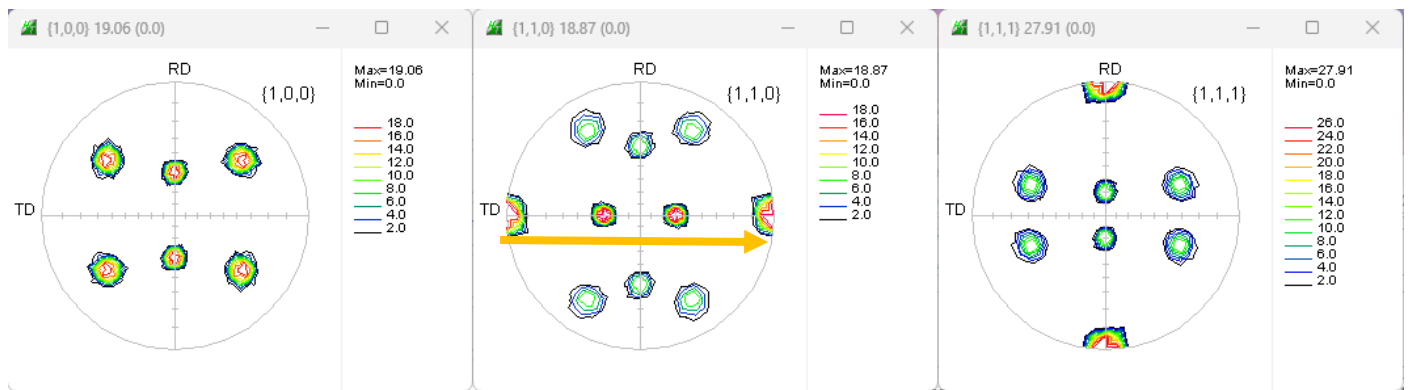
Step=5deg (fwhm=10degで作成)



fwhm=15degですそ野は±10degに広がる。

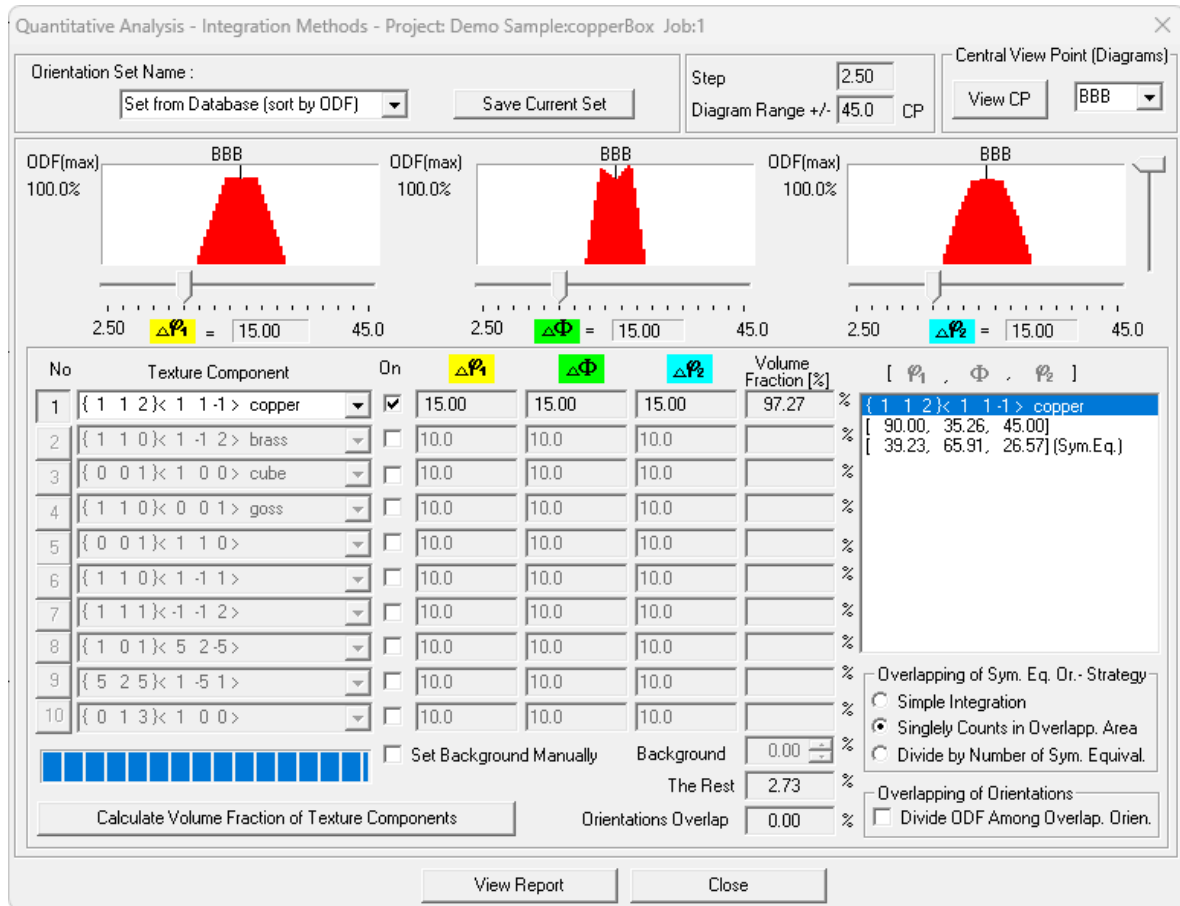
評価する極点図

copper、fwhm=10deg、step=5deg

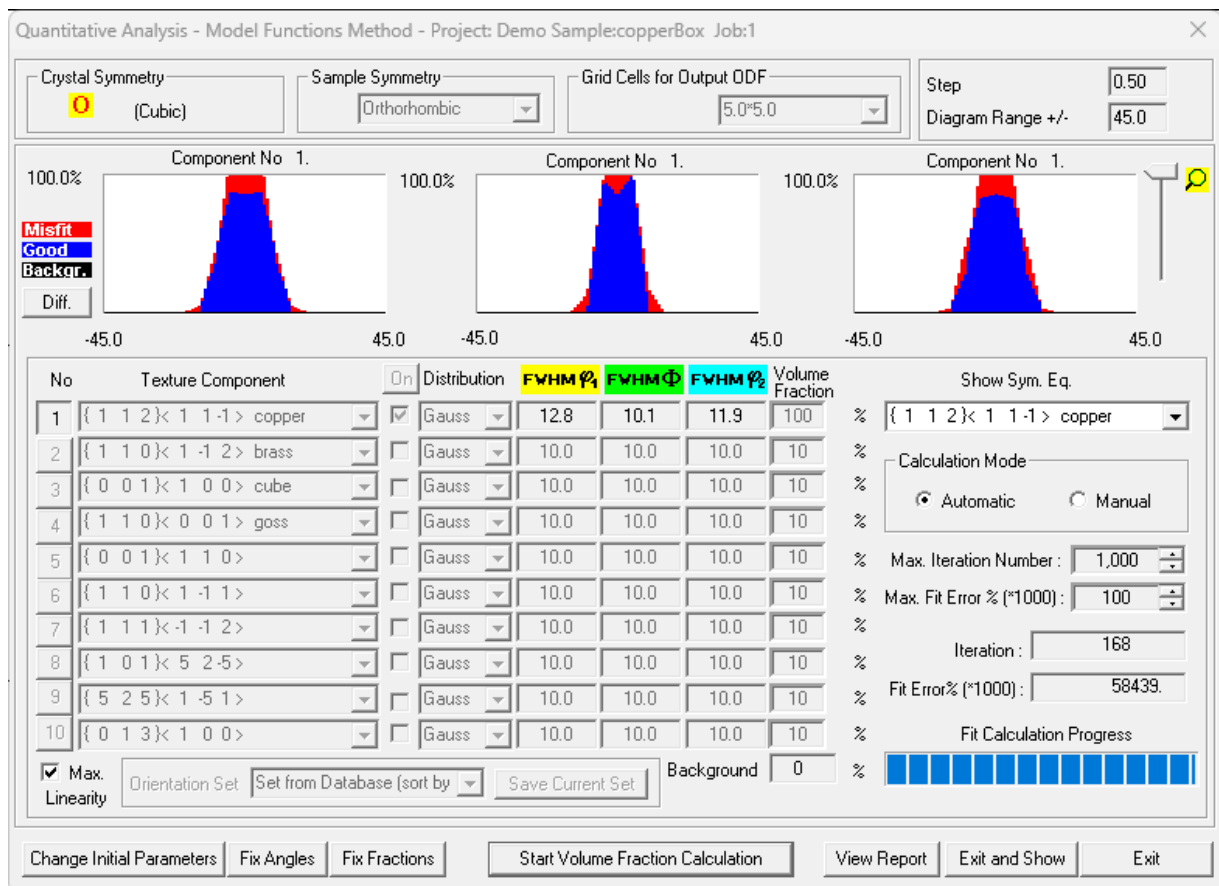


LaboTexによる評価

Box評価



Gauss評価



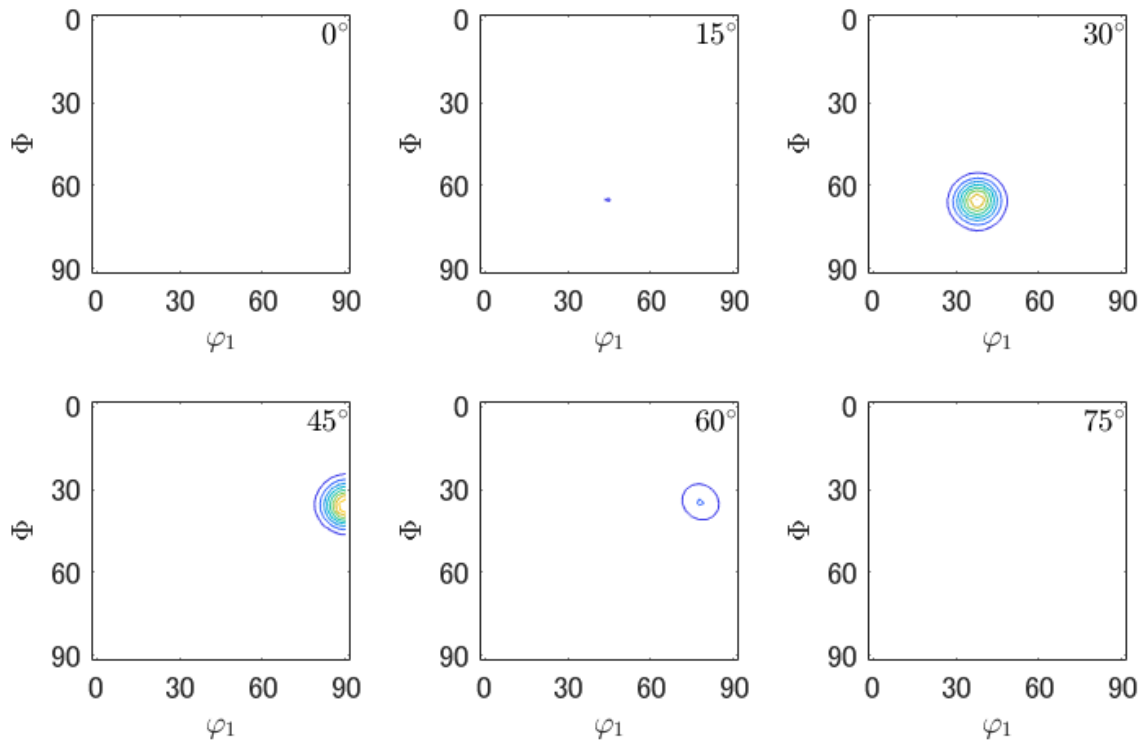
Gauss関数で対応出来ている。

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。

XRD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。

NewODF 評価

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

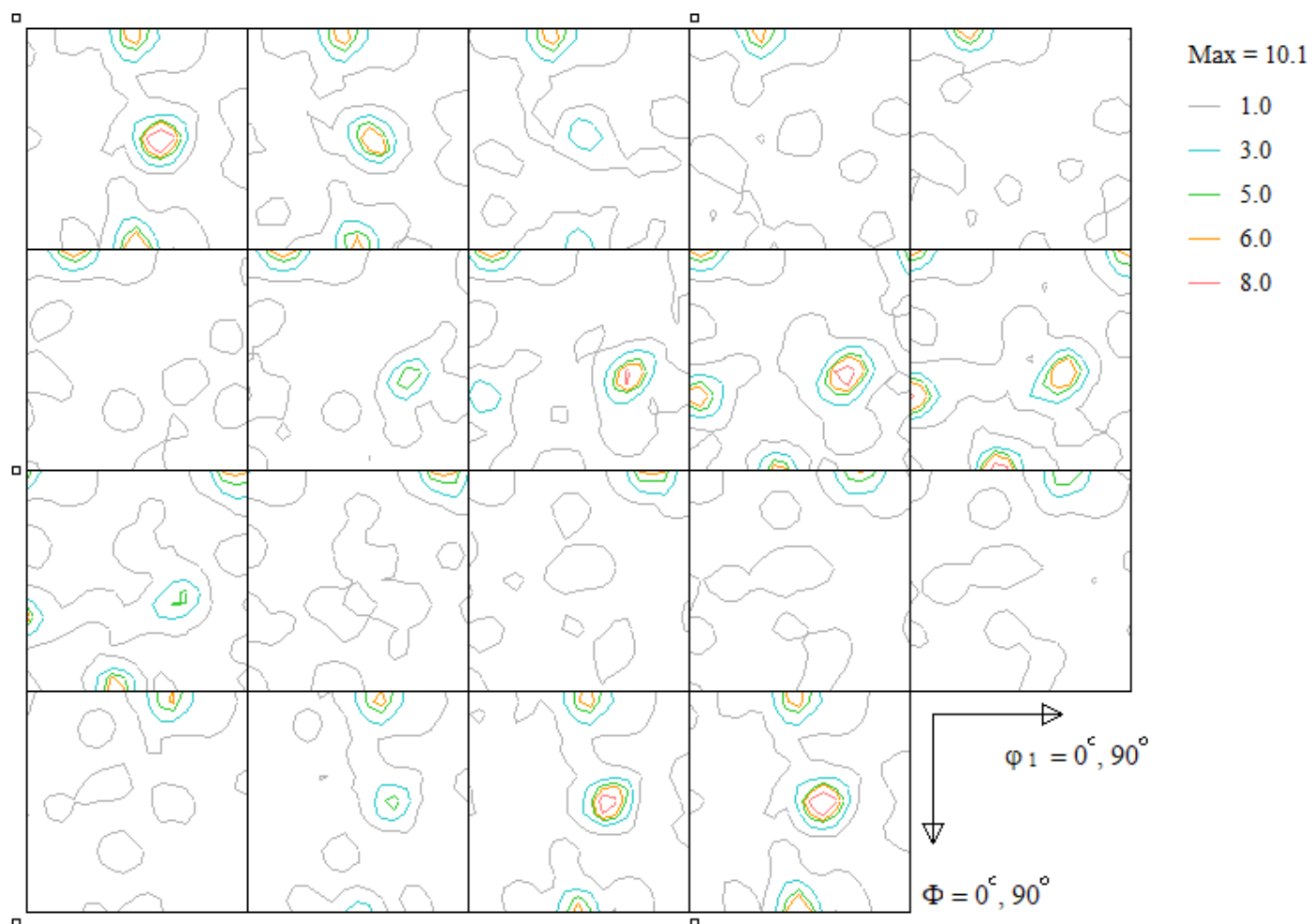
コンポーネント

| 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