

LaboTex, CTR, MTEXによる

極点図シミュレーションにおけるFWHM

2025年03月10日

HelperTex Office

概要

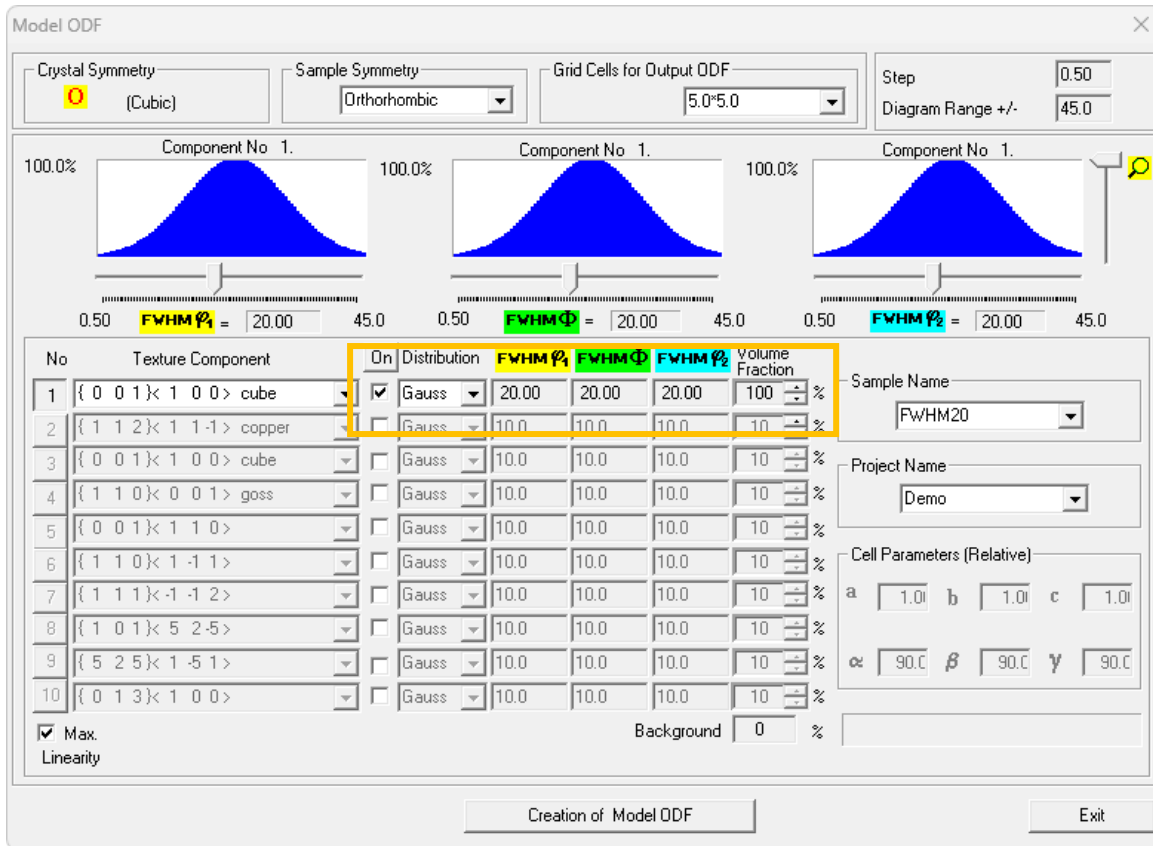
LaboTeX, CTRでは、FWHM指定、MTEXではHWHMを指定している。

以下に、Cube {100} 極点図、TD方向のプロファイルを比較してみます。

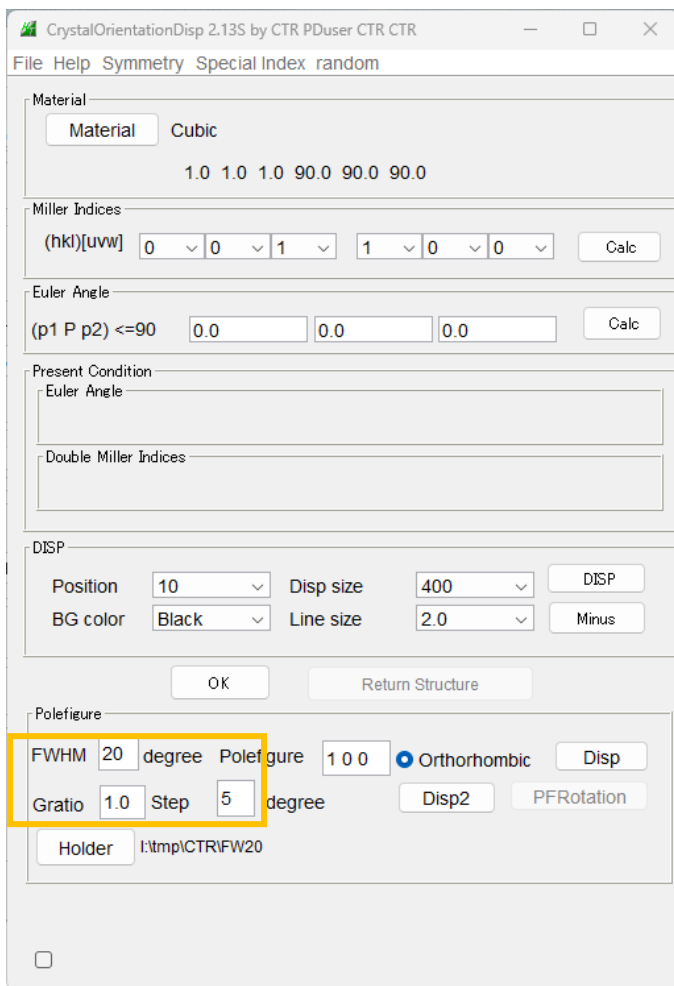
LaboTeXではGaussモードでFWHM=20deg

CTRではGaussモードでFWHM=20deg

MTEXではGaussモードでHWHM=10degを比較します。



CTR



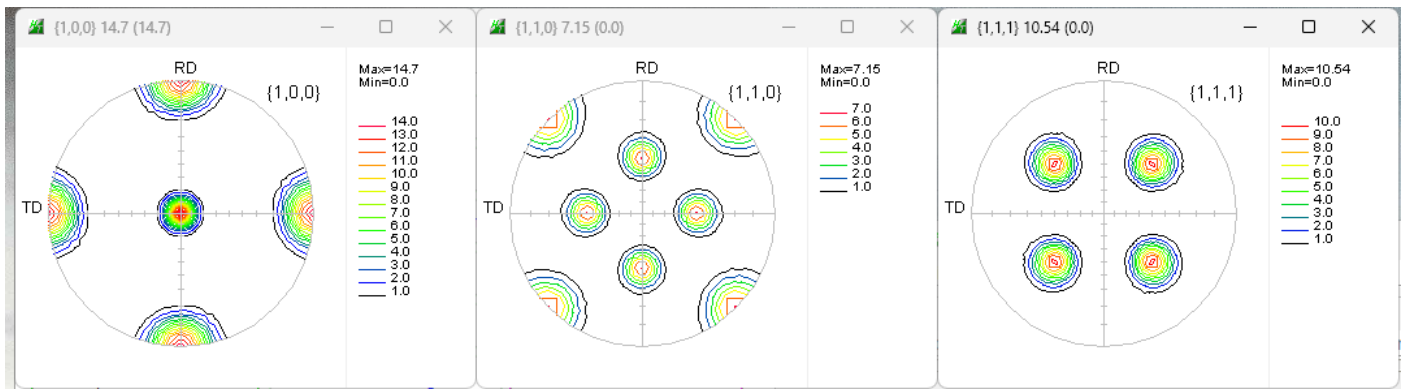
MTEX

```
>> CS= crystalSymmetry('cubic')
SS = specimenSymmetry('1')
Ori1 = orientation.byMiller([1 0 0],[0 0 1],CS)
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',10*degree)
odf=unimodalODF(Ori1,psi)
h = {Miller(1,1,1,CS),Miller(2,0,0,CS),Miller(2,2,0,CS)}
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

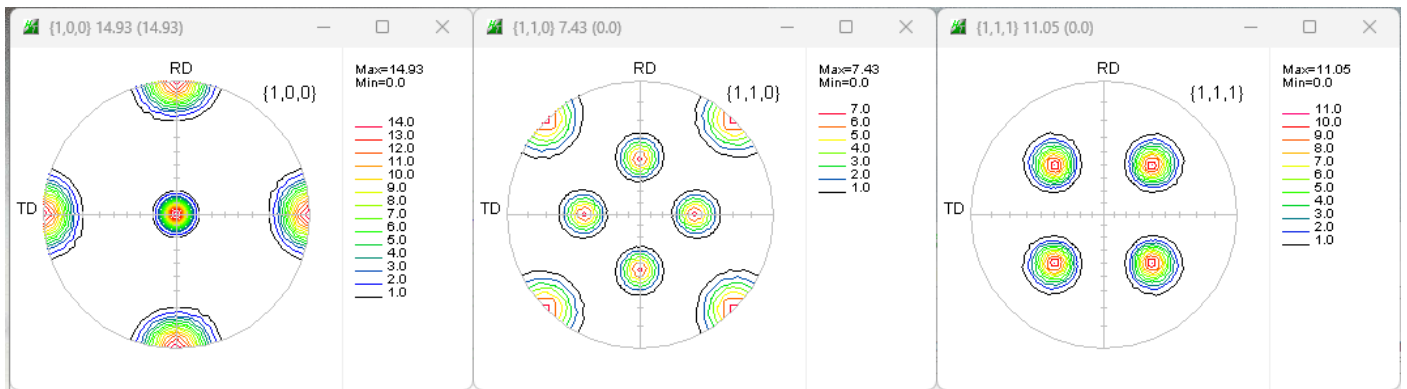
```
psi = vonMisesFisherKernel (show methods, plot)
bandwidth: 25
halfwidth: 10°
```



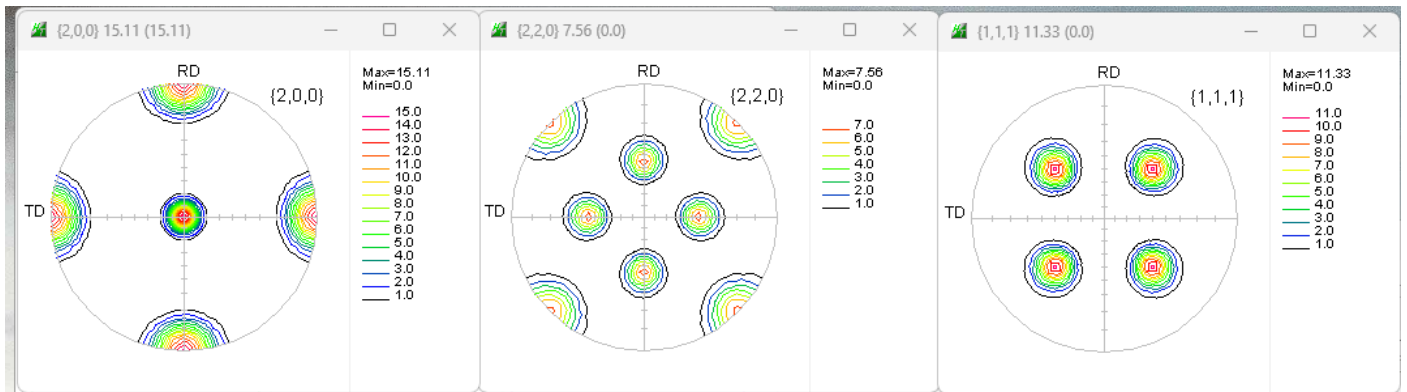
LaboTex (FWHM=20deg)



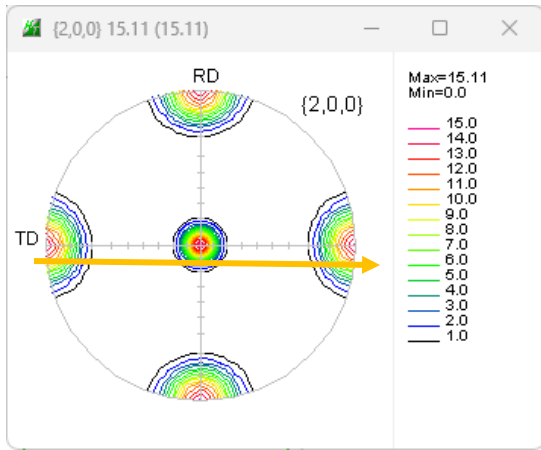
CTR (FWHM=20deg)



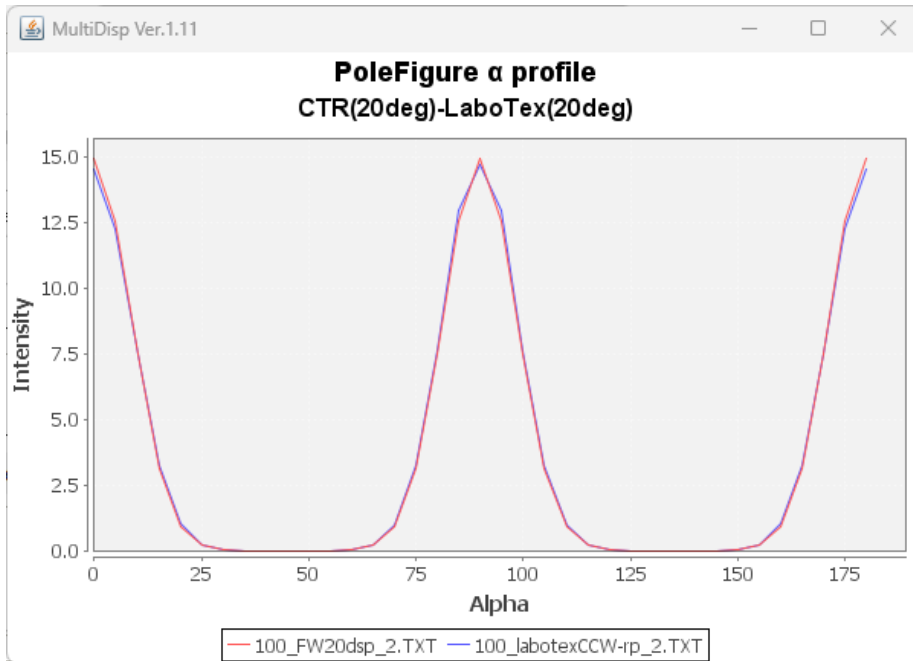
MTEX (HWHM=10deg)



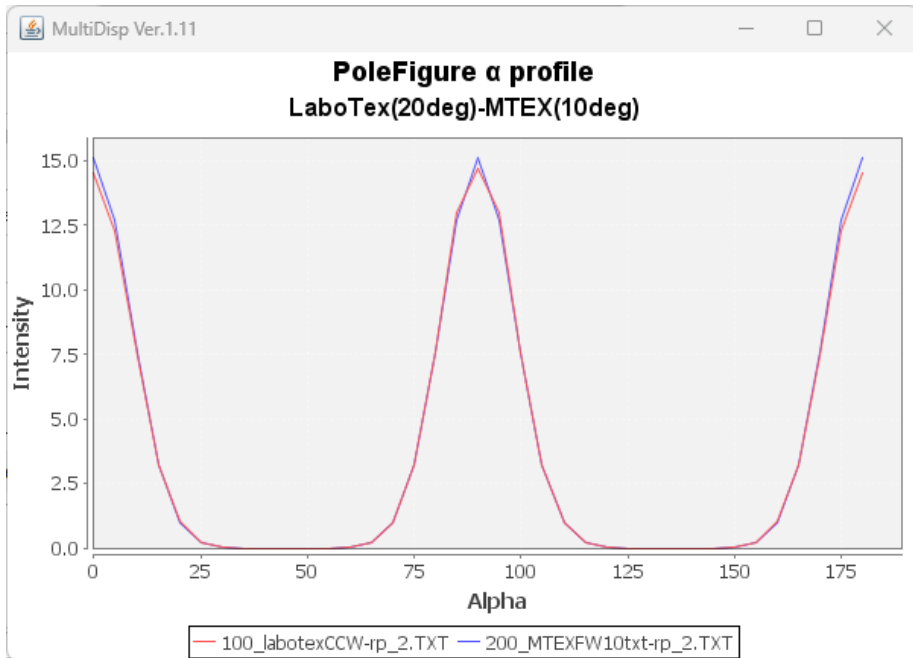
{100} 極点図 TD 方向比較



LaboTexとCTR比較



LaboTexとMTEX比較



MTEXの10degとLaboTexの20degが一致する。

まとめ

CTRではFWHMで入力し、計算はHWHMで計算

$$\text{HWHM (h)} = \text{FWHM} / 2$$

$$x = i * \text{step}$$

$$y = \text{Max} * \exp(-x * x / (2 * h * h))$$

LaboTexもFWHMを入力している。

MTEXではHWHM (=FWHM/2)を入力している。

NewODF (SmartLab) でFittingを行う

ODF計算

ODFを計算 ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: コンポーネントモデル ODFグリッド

試料の対称性: 1/4対称

φ₁ステップ(°): 5.00

φステップ(°): 5.00

φ₂ステップ(°): 5.00

α解析開始角度(°): 0.00

α解析終了角度(°): 90.00

パラメーター

結晶相: Al ODFをシミュレート

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χ²: 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

RP因子=1.70 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: 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 + - コンポーネントをDBから読み込む コンポーネントをDBに保存

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	.	Cube	■	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	100.00

コンポーネントプロパティ

パラメーター	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 (°)	20.54	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ ₁ (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ ₂ (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

分率=1.0, FWHM=20.54, でCube=100%が計算される。