

極点図から方位のプロファイル関数を求める

2025年03月12日

*HelperTex Office*

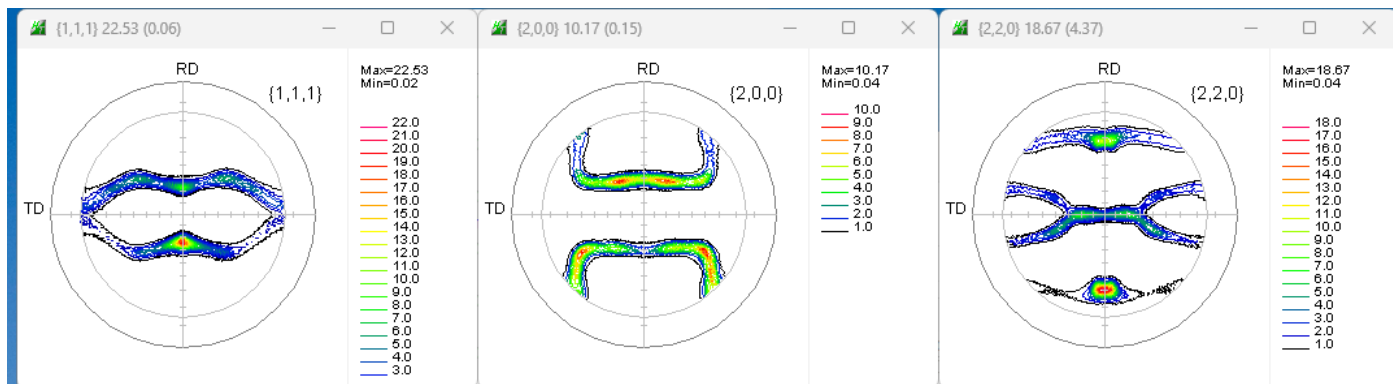
## 概要

極点図から方位の定量を行う場合、ODF解析後にVolume Fraction (体積分率) を求め、この場合重要になるのが想定するプロファイル関数である。

実際の測定データからプロファイル関数を想定してみます。

更に、求めたプロファイル関数からcube方位の極点図を作成し、体積分率を求めます。

測定データ、リガクUltima IV ゴニオ半径285, DS=1/2 g SS, RS=7 mm  
サンプリング 1 deg



## 手法

{111} 極点図用いる

PFRotationにて最大極密度を極点図の中心に移動

PoleFigureProfileにて、FWHMを算出

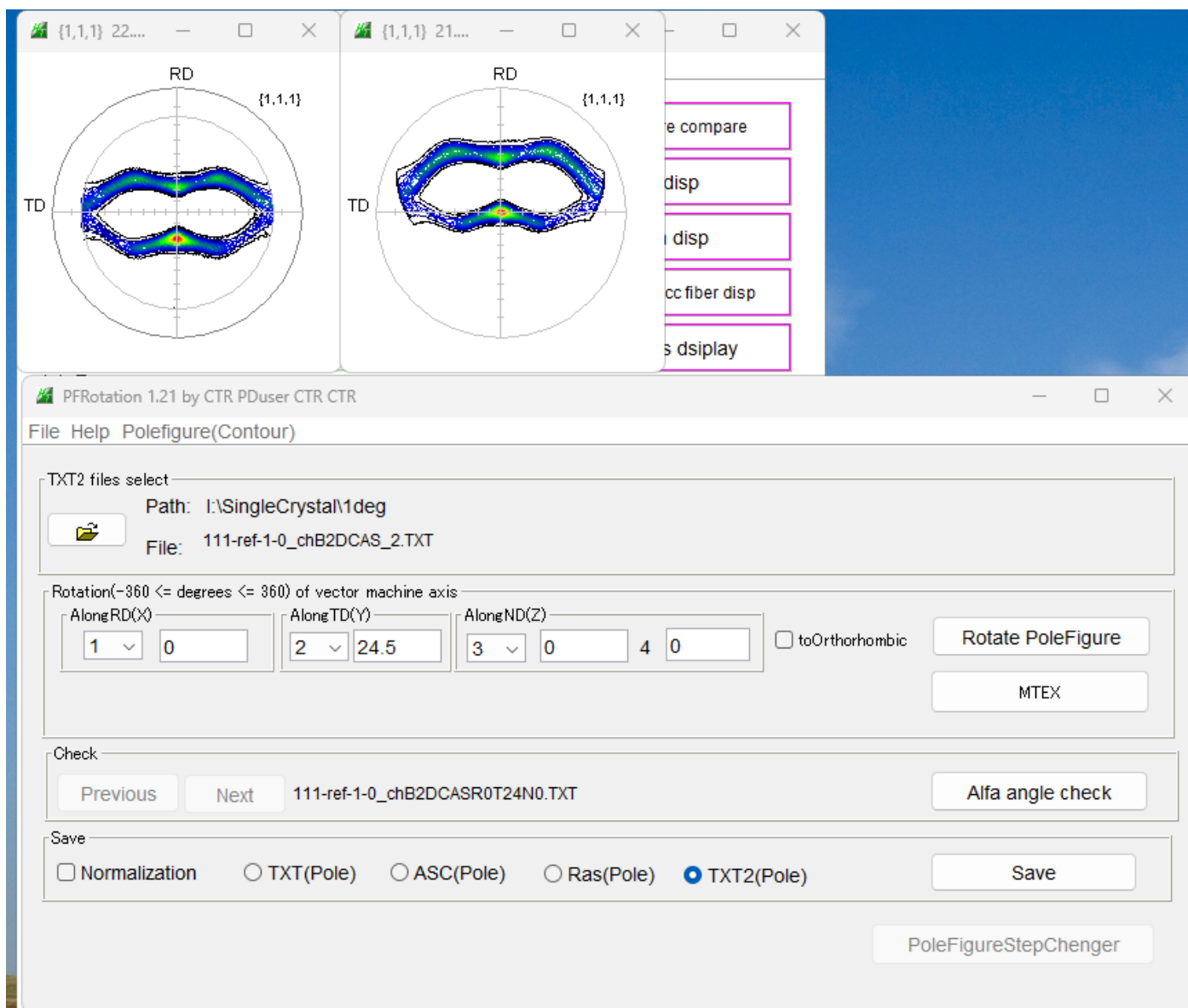
CrystalOrientationDispにて上記FWHMでcube (100%) 極点図計算

PoleFigureProfileにて、回転データと計算極点図を比較

Ratio (G/L) を変えて最適なプロファイル関数 (GaussとLorentz比率) の算出

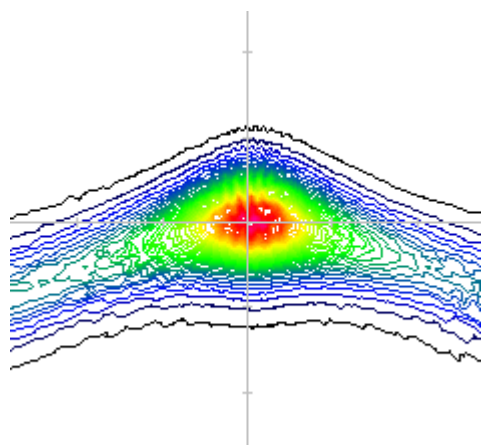
cube 100%の極点図からVolume Fractionを計算する

# {1 1 1} 極点図の回転 (TD軸回転)

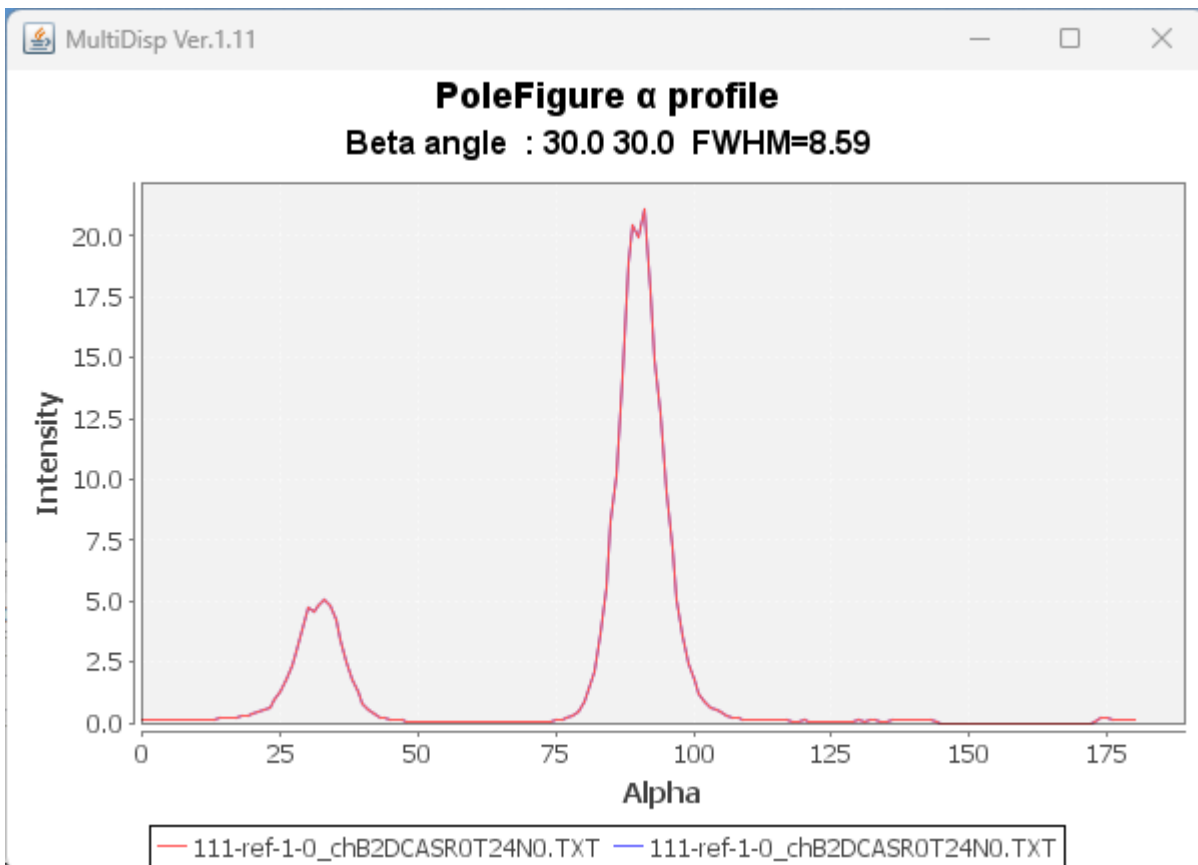
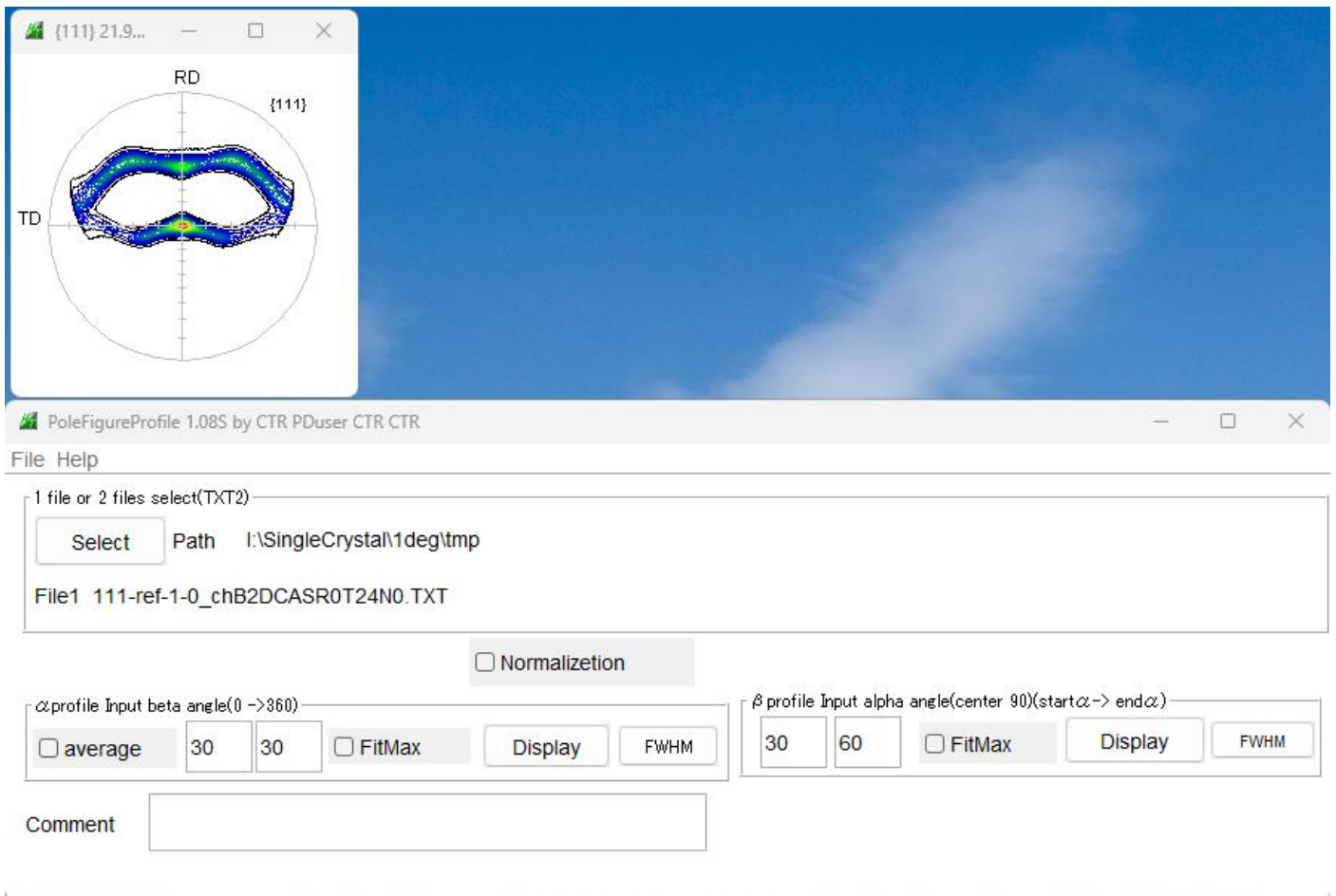


The screenshot displays the PFRotation software interface. At the top, two windows show pole figures for the {1,1,1} reflection, with RD and TD axes. The left window shows a standard pole figure, while the right window shows a rotated version. Below these are several buttons: 'e compare', 'disp', 'disp', 'cc fiber disp', and 's display'. The main window, titled 'PFRotation 1.21 by CTR PDuser CTR CTR', contains a 'File Help Polefigure(Contour)' menu. The 'TXT2 files select' section shows the path 'I:\SingleCrystal\1deg' and file '111-ref-1-0\_chB2DCAS\_2.TXT'. The 'Rotation(-360 <= degrees <= 360) of vector machine axis' section has input fields for 'AlongRD(X)' (1, 0), 'AlongTD(Y)' (2, 24.5), and 'AlongND(Z)' (3, 0, 4, 0). There is a 'toOrthorhombic' checkbox and 'Rotate PoleFigure' and 'MTEX' buttons. The 'Check' section has 'Previous', 'Next', and 'Alfa angle check' buttons, with the file '111-ref-1-0\_chB2DCASR0T24N0.TXT' selected. The 'Save' section has radio buttons for 'Normalization', 'TXT(Pole)', 'ASC(Pole)', 'Ras(Pole)', and 'TXT2(Pole)' (selected), and a 'Save' button. A 'PoleFigureStepChenger' button is at the bottom right.

回転極点図の拡大

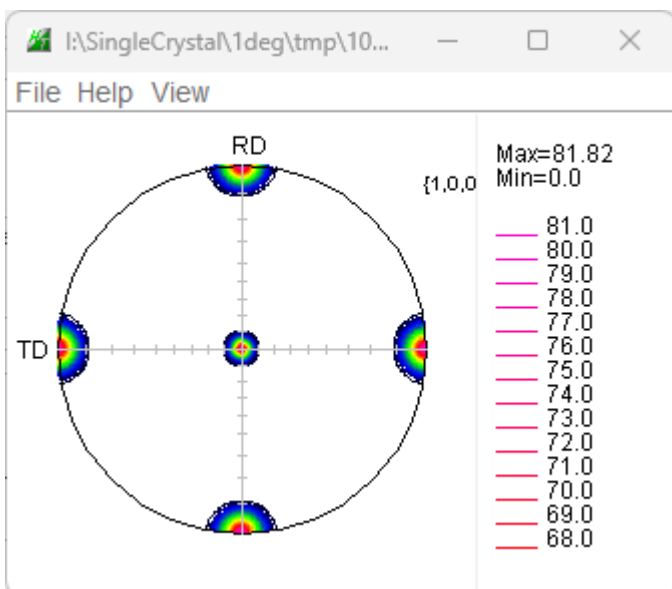
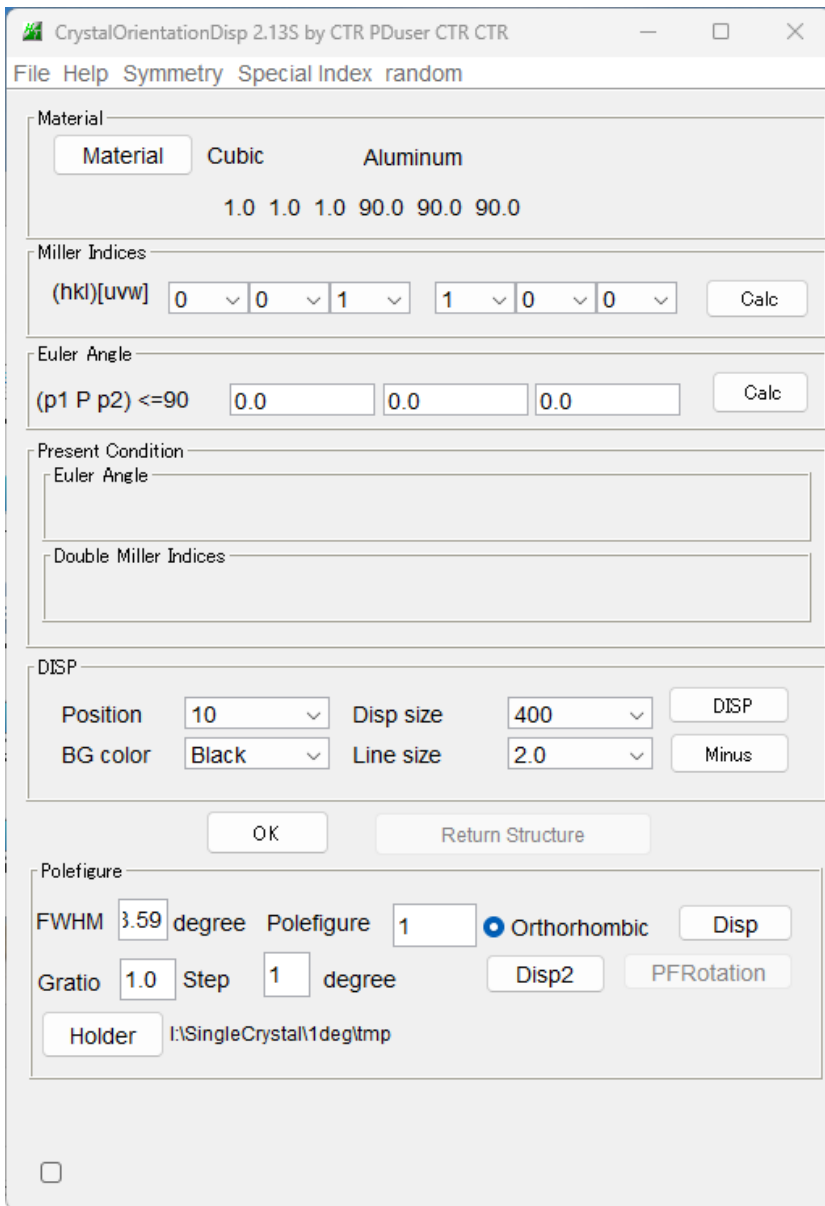


PoleFigureProfileにて、FWHMを算出



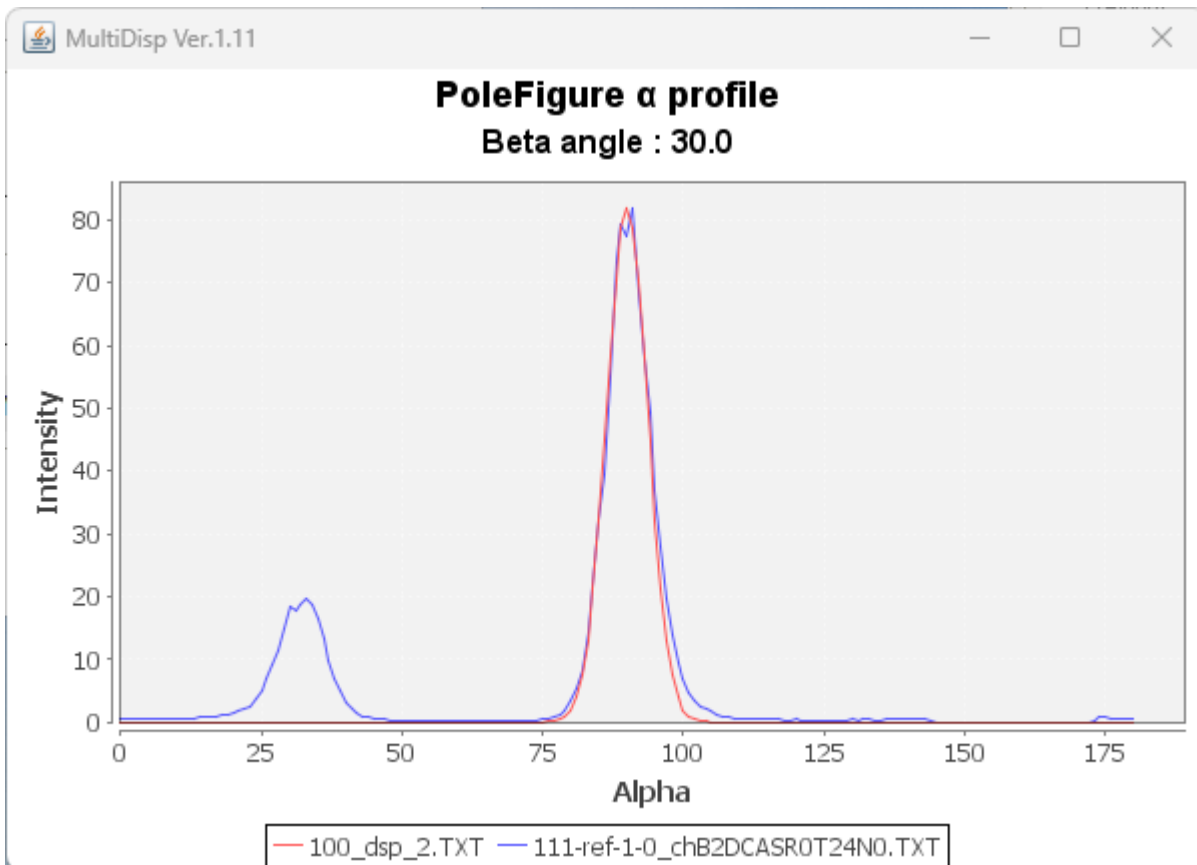
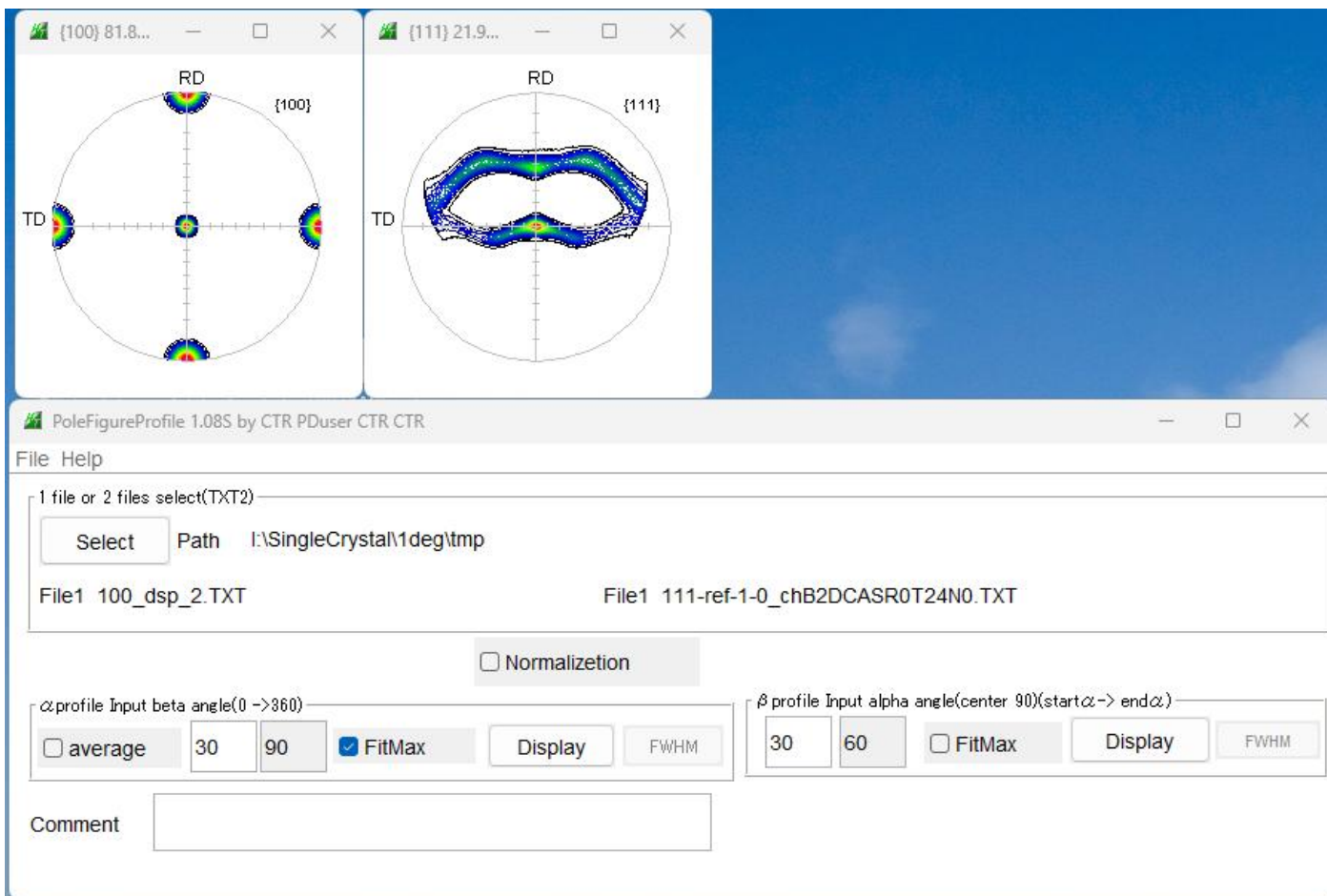
FWHM=8.59が計算される。

CrystalOrientationDispにて上記FWHM (8.59) のcube極点図計算



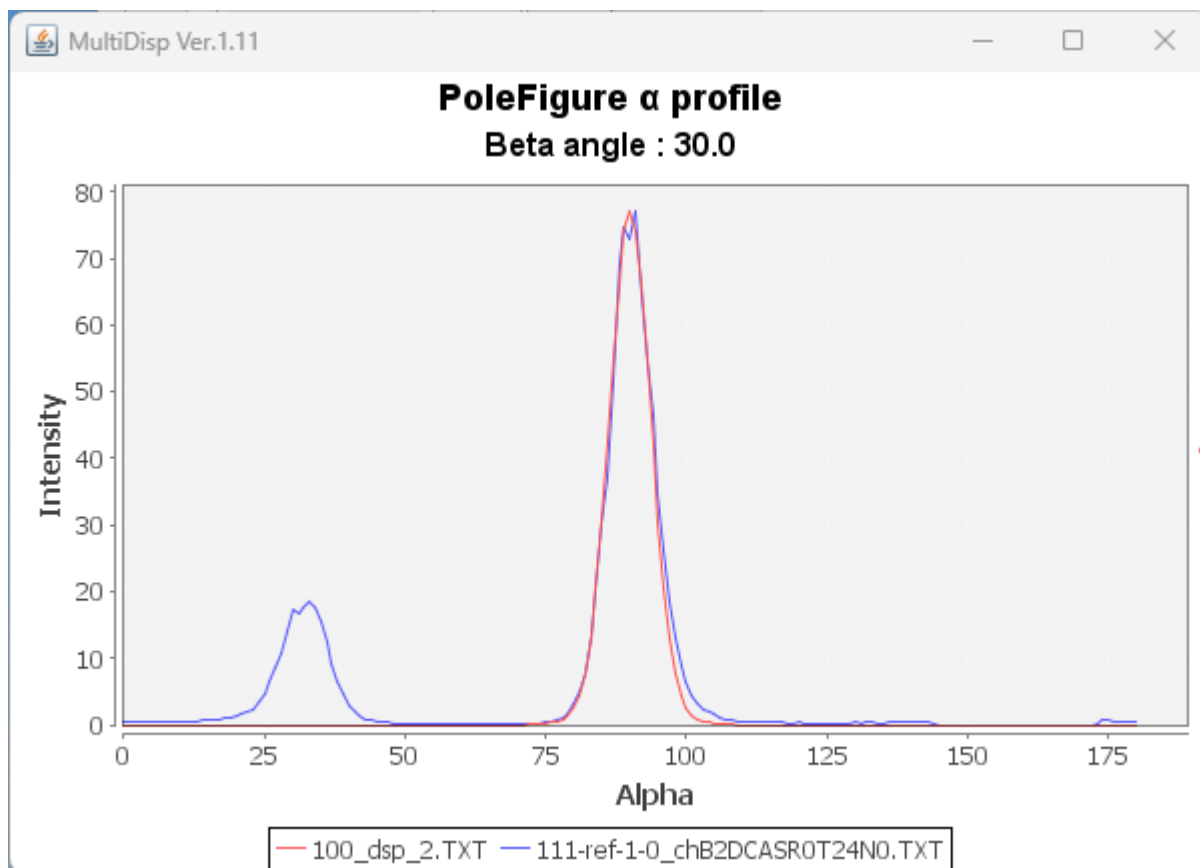
FWHM=8.59 deg の Gauss 関数 cube {100} 極点図生成

PoleFigureProfileにて、回転データと計算極点図を比較

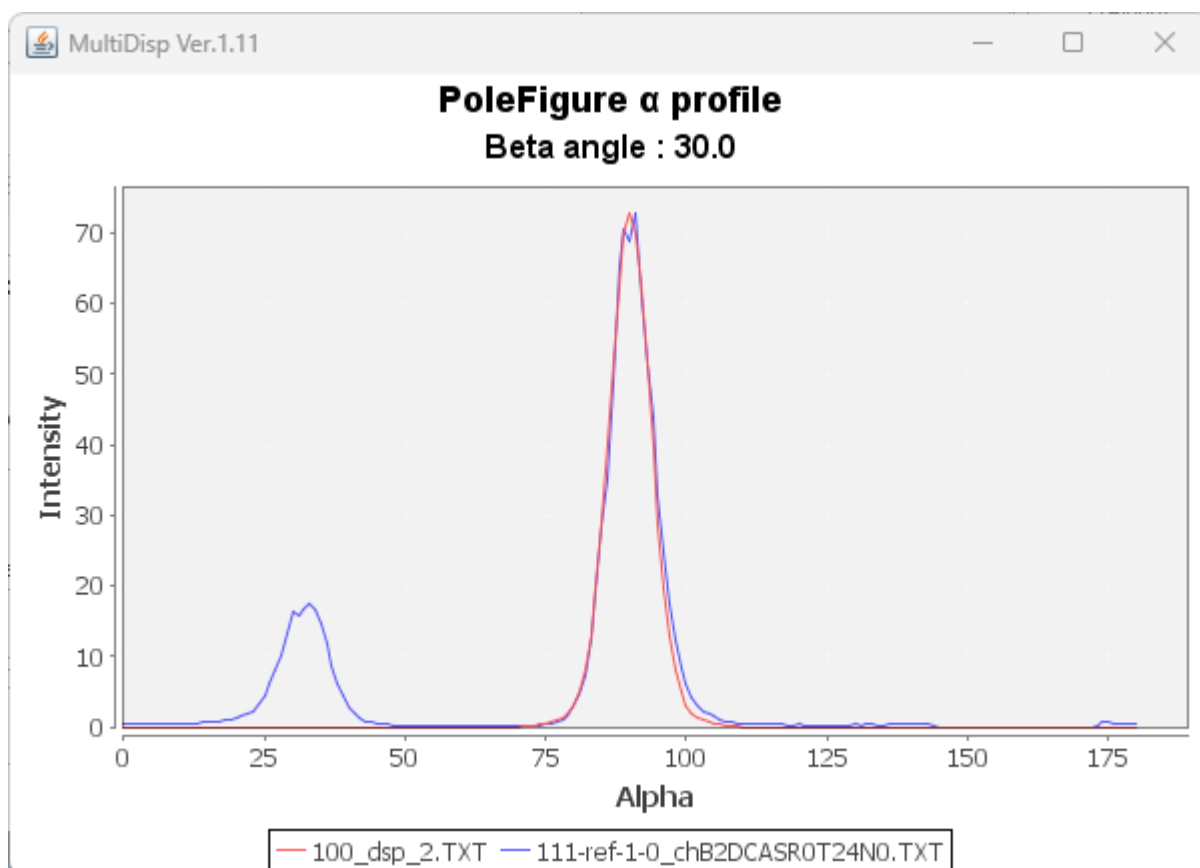


ほぼ一致するが、Ratioを変えてFittingしてみます。

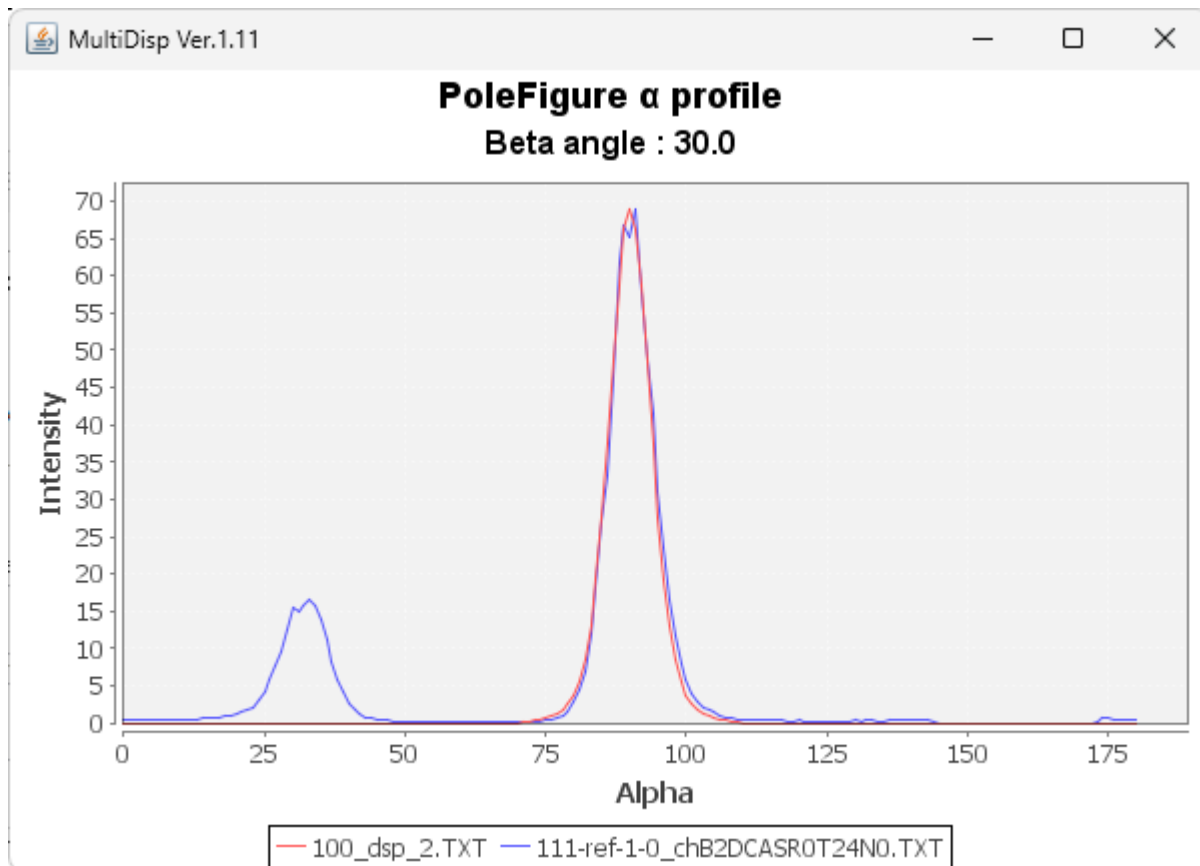
Gratio=0.9



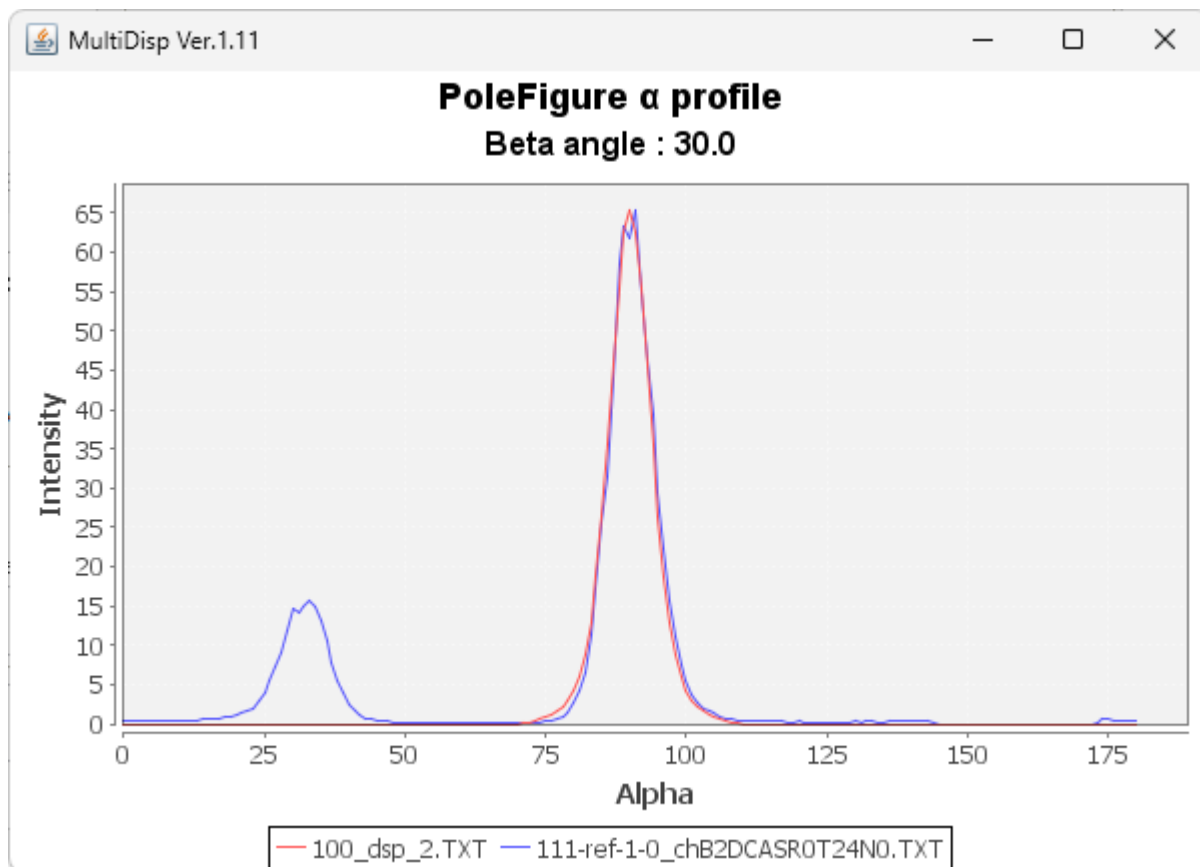
Gratio=0.8



Gratio=0.7

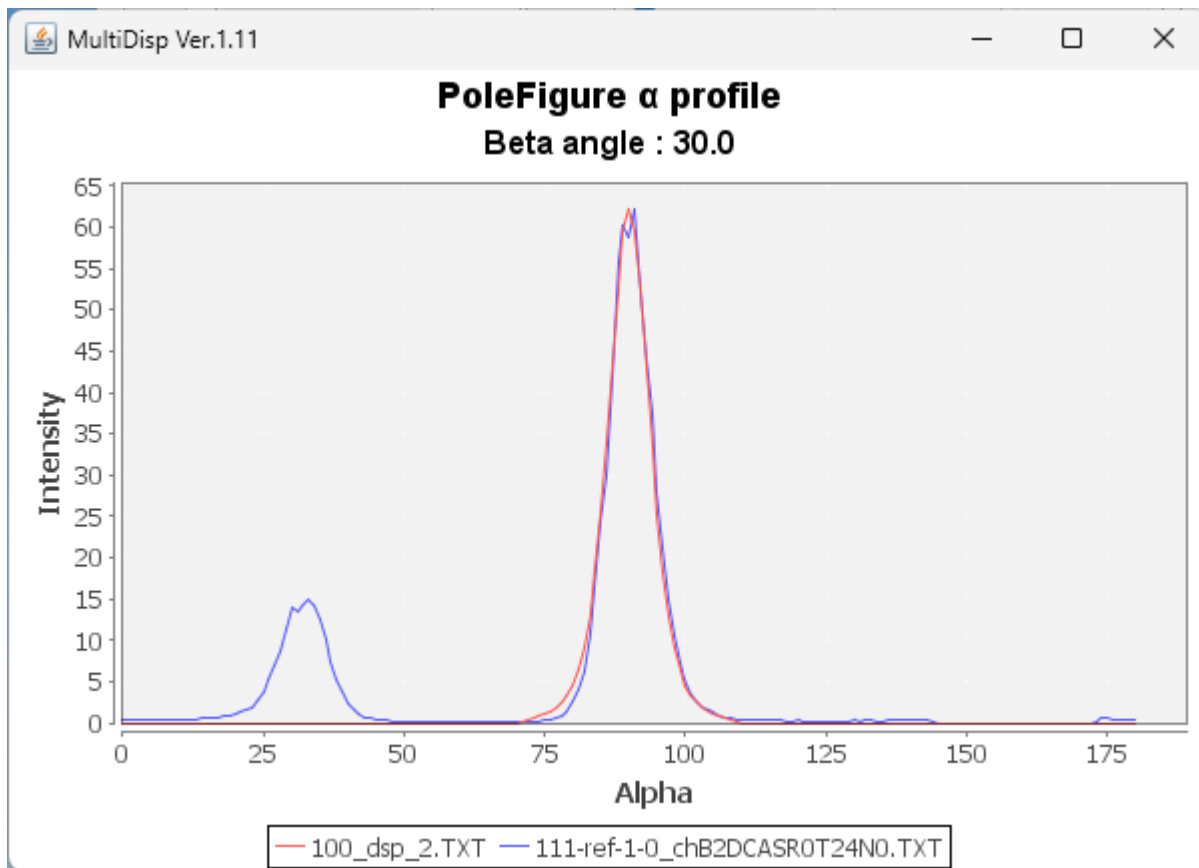


Gratio=0.6

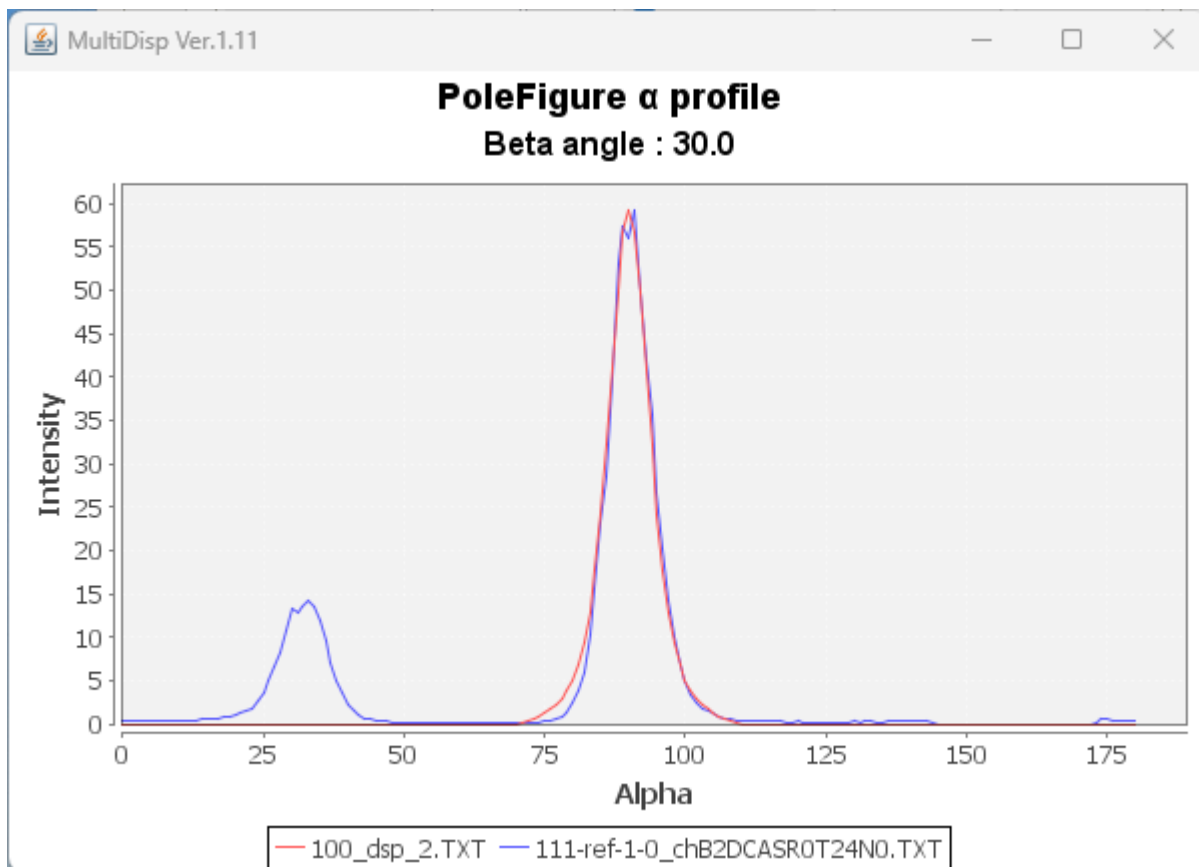




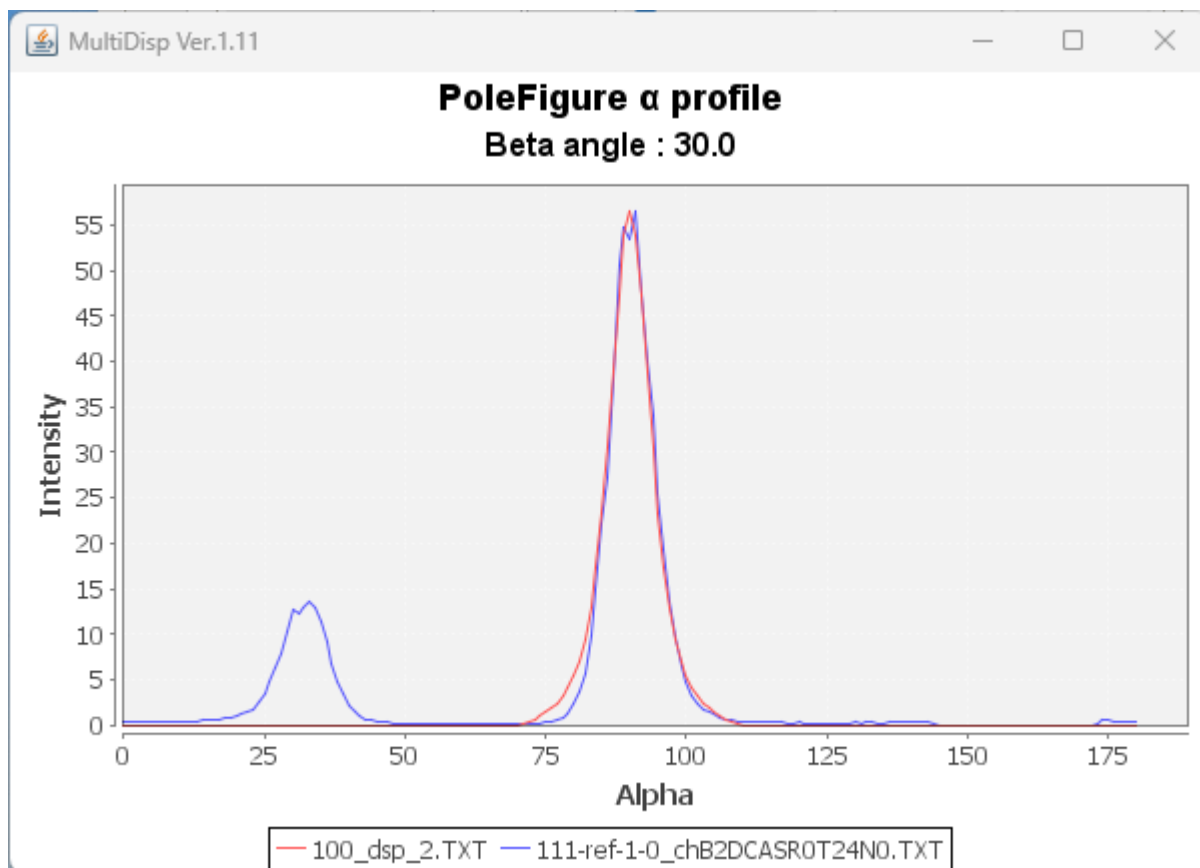
Gratio=0.5



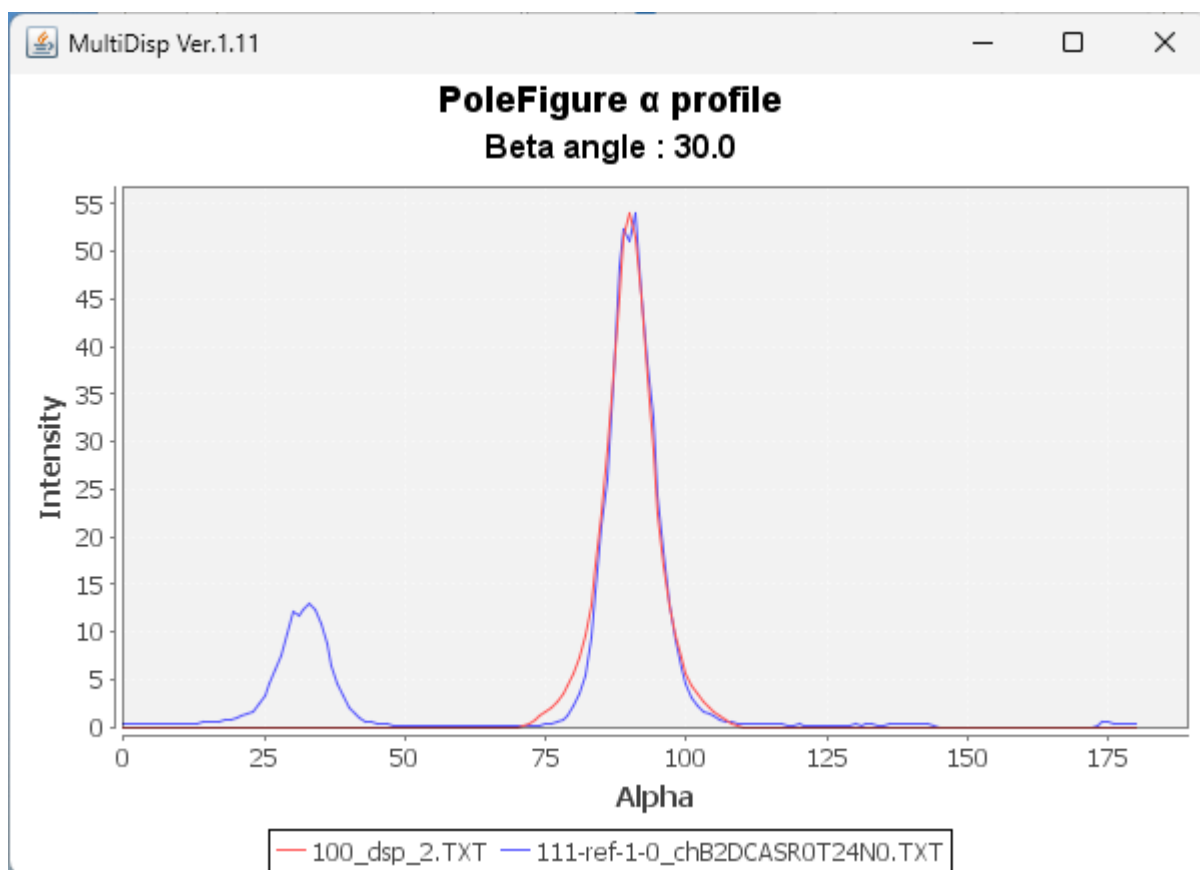
Gratio=0.4



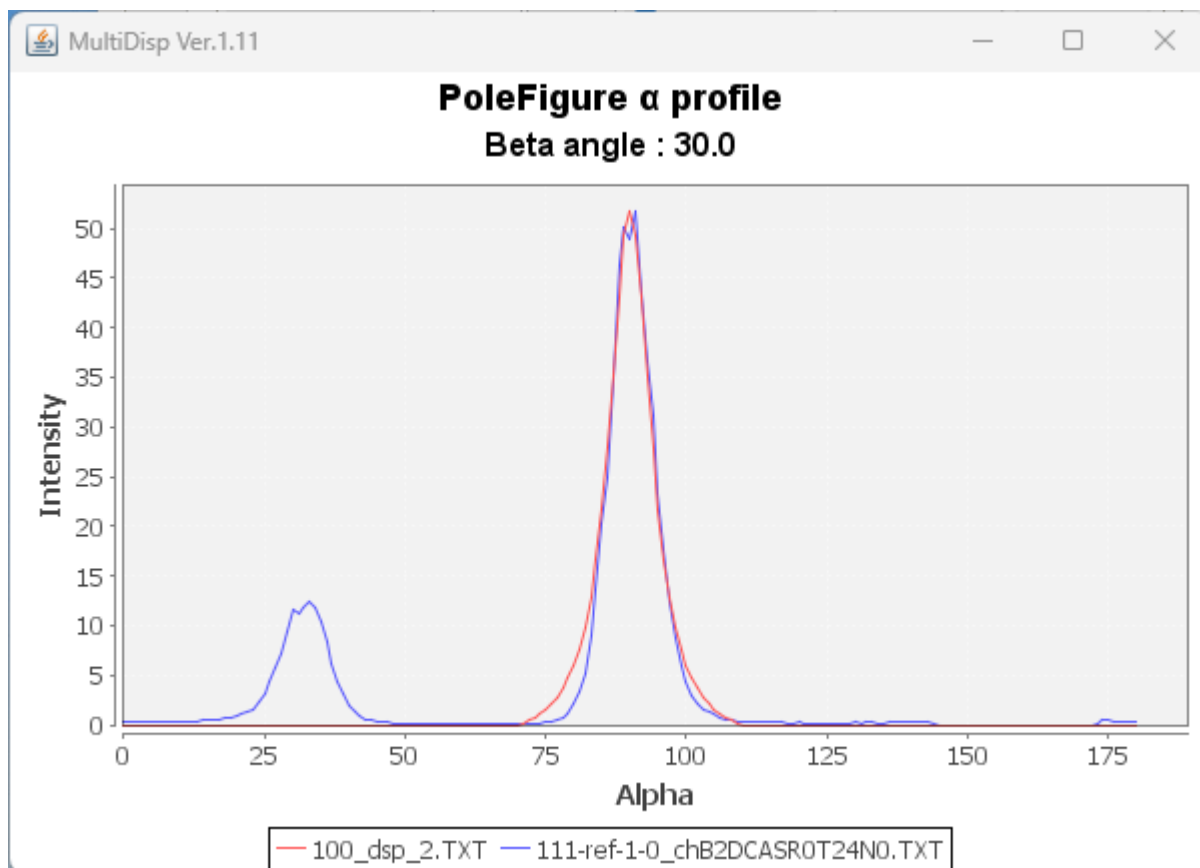
Gratio=0.3



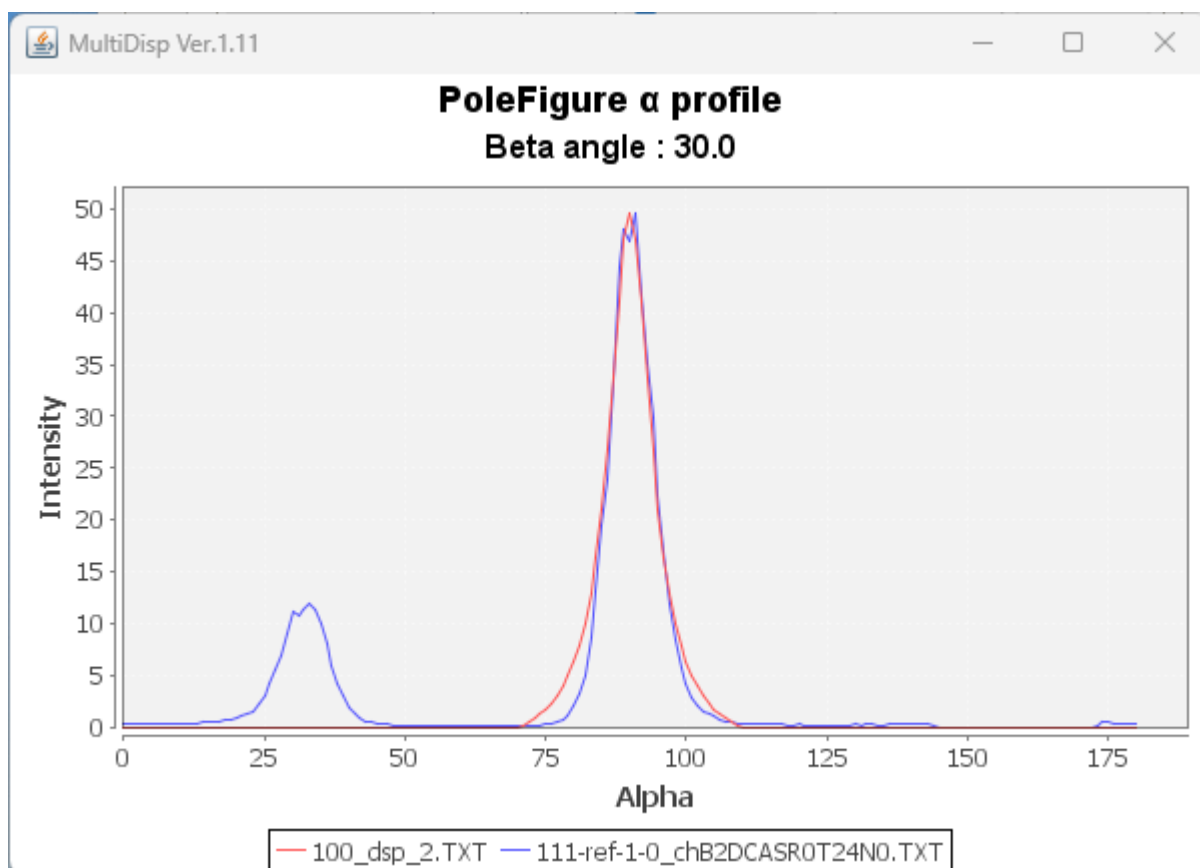
Gratio=0.2



Gratio=0.1



Gratio=0.0



## 結果

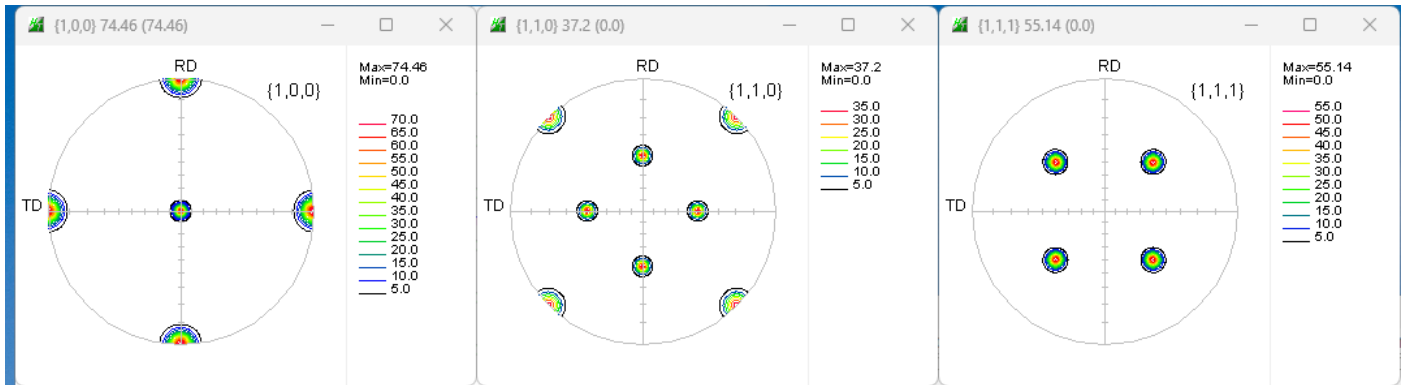
$G r a s i t o = 0.7$  の  $F i t t i n g$  が良さそうに見えます。

以降、 $G r a t i o = 0.7$  の  $c u b e$  極点図を作成し、 $V o l u m e F r a c t i o n$  を計算します。

$F W H M = 0.7$

$0.7 * G a u s s + 0.3 * L o r e n t z$  の極点図を作成

$S t e p = 1.0 d e g$

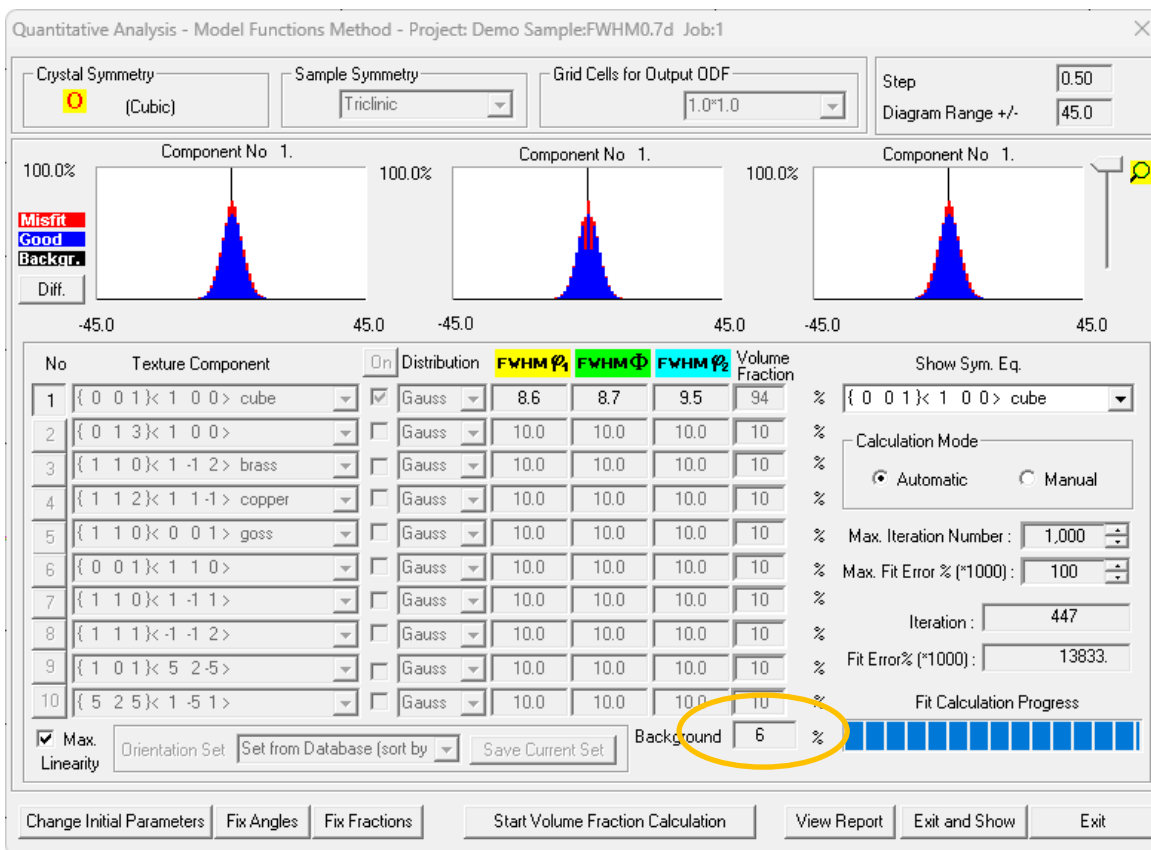


$M i n i = 0$  は  $r a n d o m$  成分が 0% を示しています。

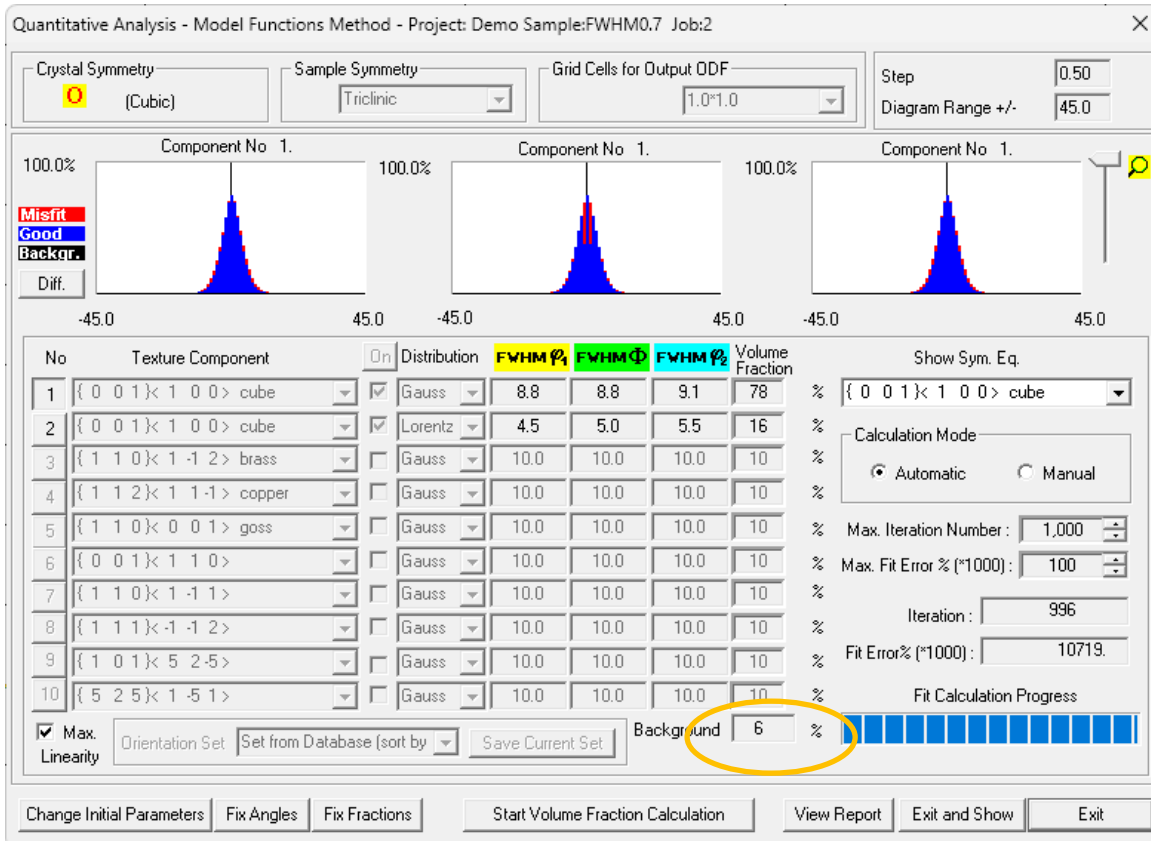
LaboTexでVolumeFraction計算

1deg, Triclinic計算

Gauss関数



Gauss+Lorentz関数

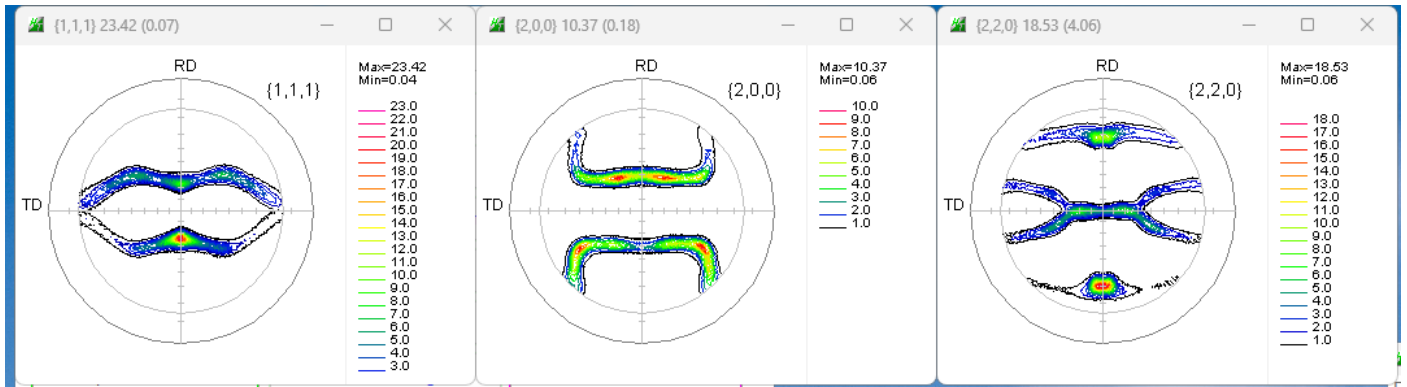


どちらも、random=6%で同一の結果

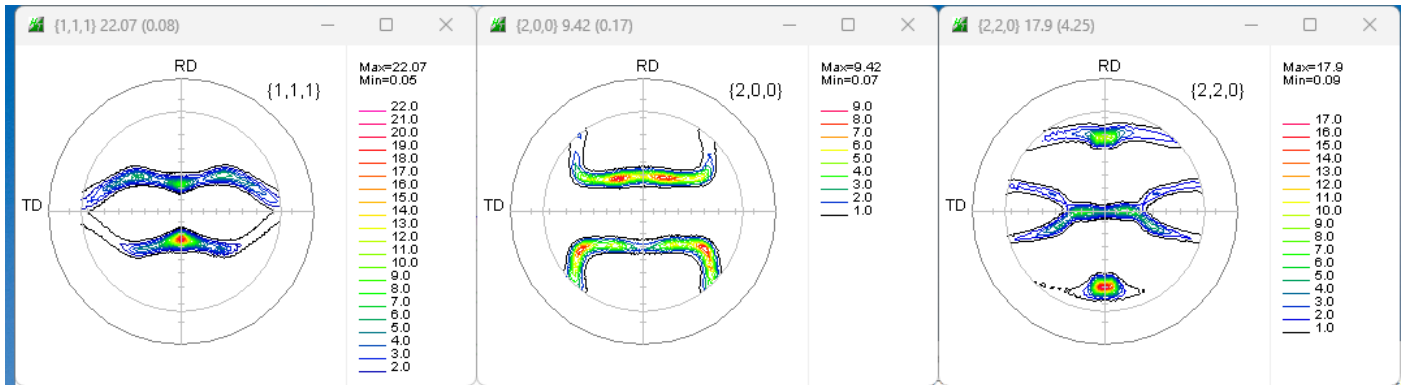
LaboTexでは、Gauss+LorentzでもGaussで計算可能

# 測定ステップによる測定極点図（規格化の実行）

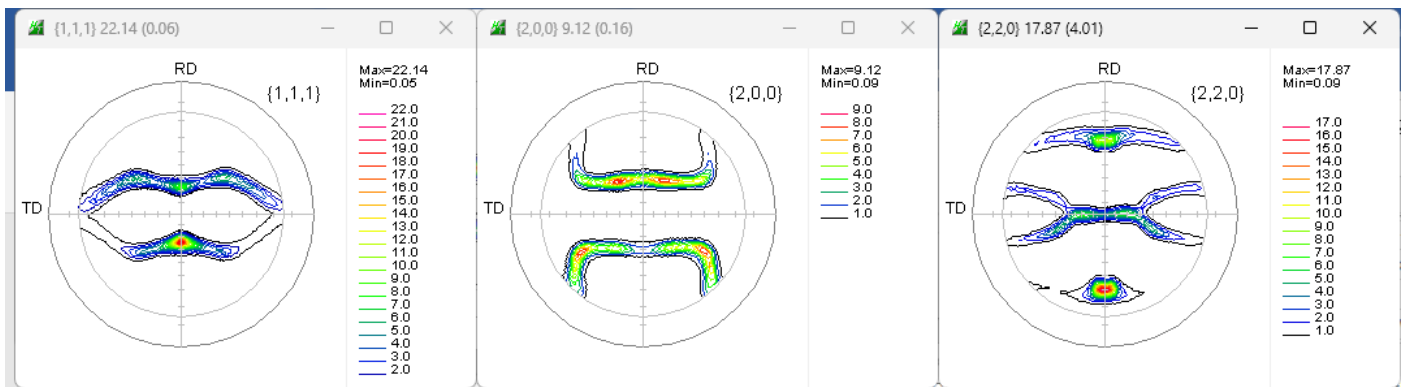
## 1. 0 deg



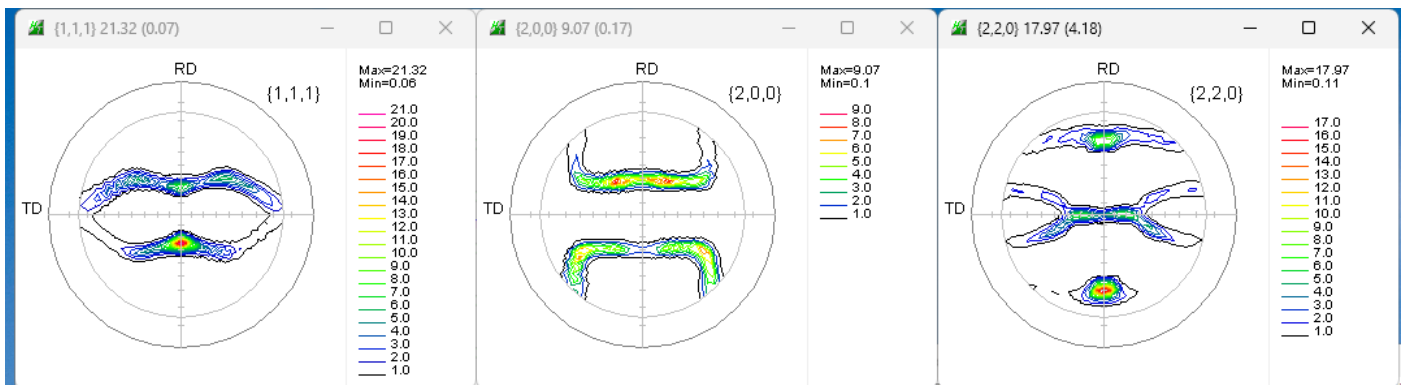
## 2. 0 deg



## 2. 5 deg



## 5 deg



ほぼ同様の極点図が描画できています。