## LaboTexにおけるVolumeFraction

VolumeFraction結果はテキストデータとして登録されています。(PODファイル)

新たに結晶方位を登録する方法

常に同一結晶方位群で定量を行う場合

複数のサンプル比較を行う場合

LaboTexの結果は単なるテキストファイルですが 工夫すれば色々な報告書作成は可能です。

10年09月16日

概要

ODF解析を行って結晶方位分布図(ODF図)を描画しても結晶方位の定量値は計算されていません。 定量値は Volume Fraction 値を計算しなければ決まりません。Volume Fraction の計算には2方法あります。 Integration Method 法と Model Function Method 法です。 Integration Method 法は、

ODF の Euler 空間で指定した空間の積分比率の算出法で、

例えば(112)[11-1]copper 結晶方位位置 Euler 角で(90.0,35.26,45.00)を中心に各 Euler 角方向に広がり ⊿10deg の空間に占める結晶方位分布密度の割合

Model Function Method 法は、

Integration Method 法との違いは、範囲がBoxではなく、空間的な関数フィッティング法である。 どちらも解析した結果が画面表示されます。検索対象はデータベースに登録されている結晶方位

Model Function 法では結果ファイルが作成されます。

データ管理法とテキストファイル

user名、Project、sample名で管理される。 User : Piotr Project:VolumeFraction sample :sample1 とした場合

Volume Fraction 結果は

 $C: \label{eq:laborer} Each and \label{eq:laborer} C: \label{eq:laborer} Label{eq:laborer} Label{eq:laborer} Cubic. \\ Label{eq:laborer} Label{eq:laborer} Label{eq:laborer} Label{eq:laborer} Label{eq:laborer} Label{eq:laborer} Label{eq:laborer} Label{eq:laborer}$ 

に sample1.POD として登録されます。

LaboTex - Texture - Quantitative Analysis Report User: Piotr Project: VolumeFraction Sample: sample1 Job: 2 Date:2010/09/16 Time:10:24:00

| Volume<br>Fraction    | FWHM FWHM<br>Phi1      | FWHM<br>Phi   | Phi2 |        | _ | Or | ientat | ior | 1  |      |
|-----------------------|------------------------|---------------|------|--------|---|----|--------|-----|----|------|
| Component No 1        | - Distribution         | :Gauss<br>9 1 | 11.2 | ĺ      | 1 | 1  | 1 1/2  | Ω   | 1  | -1 > |
| Component No 2        | - Distribution         | :Gauss        | 10.7 | L<br>r | 1 | 1  | 1 1 1  | •   | 1  |      |
| 4.4<br>Component No 3 | 22.3<br>- Distribution | 9.9<br>:Gauss | 10.7 | ł      | I | Ι  | }<     | -   | -  | 2 >  |
| 0.0<br>Component No.4 | 5.6<br>- Distribution  | 8.9<br>:Gauss | 7.2  | {      | 2 | 3  | 3 }<   | 0   | 1  | -1 > |
| 0.0                   | 6.3                    | 7.3           | 10.8 | {      | 3 | 2  | 3 }<   | 1   | -3 | 1 >  |



データベース登録法

新たに

{001}<520>CR

{001}<110>RW

{011}<1-22>PP を登録する。

Analysis->Orientations Type Database

| Orientations Type Database  |   | $\times$ |  |  |  |  |  |
|---|---|----------|--|--|--|--|--|
| Crystal Symmetry Systems Number of Orientations   |   |          |  |  |  |  |  |
| Cubic   | 22  |          |  |  |  |  |  |
| Database  |   | ]        |  |  |  |  |  |
| No Orientation Type Name  | P1 Φ P2   |          |  |  |  |  |  |
| 1 { 1 1 1 × 0 1 ·1 ><br>2 { 1 1 1 × ·1 ·1 2 ><br>3 { 2 3 3 > 0 1 ·1 ><br>4 { 3 2 3 > 1 ·3 1 ><br>5 { 1 2 2 > 2 ·2 1 ><br>6 { 1 2 3 > 4 1 ·2 ><br>7 { 1 2 3 > 4 1 ·2 ><br>8 { 1 3 2 > 6 ·4 3 > 5 ·1<br>9 { 2 3 1 > 3 ·4 6 > 5 ·2 | -120.00     54.74     45.00       90.00     54.74     45.00       -113.09     50.24     33.69       23.09     50.24     56.31       26.57     48.19     26.57       -46.91     36.70     26.57       -46.91     36.70     26.57       27.03     57.69     18.43       52.87     74.50     33.69 |          |  |  |  |  |  |
| Delete Edit   | Delete Edit New (HKL} <uvw></uvw>   |          |  |  |  |  |  |
| Orientation Euler Angles     P1     Ф     P2       Fiber      Orientation Type Name     P1     Ф     P2       Angle Part     Name     (-360 - 360)     (-180 - 180)     (-360 - 360)       {     0.0, 0.0, 0.0}                 |   |          |  |  |  |  |  |
| Add/Change Cancel   |   |          |  |  |  |  |  |
| Close   |   |          |  |  |  |  |  |

New で追加



| Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: VolumeFraction Sample:sample1 Job:3  |   |  |   |  |  |  |  |  |
|--|---|--|---|--|--|--|--|--|
| Crystal Symmetry Sample Symmetry Grid Cells for Output ODF Step 0.50   O (Cubic) Orthorhombic 5.0*5.0 Diagram Range +/- 45.0   |   |  |   |  |  |  |  |  |
| 100.0% Centre of Orientat  | ion 100.0%  | Centre of Orientation  |   |  |  |  |  |  |
| No     Texture Component       1     {1 1 0}<001> goss   | On Distribution   | <b>FWHM% FWHMØ FWHM</b><br>10.0 10.0 10.0  | Yolume     Show Sym. Eq.       15     %   |  |  |  |  |  |
| 2 {1 1 2}< 1 1 ·1> copper<br>3 {1 1 0}< 1 ·1 2> brass  | Gauss   | 10.0     10.0     10.0       10.0     10.0     10.0       10.0     10.0     10.0 | 12 * Calculation Mode   12 * •   12 * •   12 * •  |  |  |  |  |  |
| 5 {1 3 2}< 6 4 3> 5-1<br>6 {2 3 1}< 3 4 6> 5-2   | ✓ Gauss ✓ | 10.0     10.0     10.0       10.0     10.0     10.0       10.0     10.0     10.0 | 7     2     %       7     2     %       7     2     %       7     2     %       7     2     %       7     2     % |  |  |  |  |  |
| 7 { 2 1 3}: -3 -6 4> 5-3<br>8 { 2 3 1}: -3 4-6> 5-4<br>9 { 0 0 1}: 5 2 0> CR   | ✓ Gauss ✓ | 10.0     10.0     10.0       10.0     10.0     10.0       10.0     10.0     10.0 | 7     -     %       7     -     %       7     -     %       7     -     %       7     -     %                     |  |  |  |  |  |
| 10 { 0 0 1 }   1 0 > RW   ▼   Gauss   10.0   6 ÷ %   Fit Calculation Progress     Imax.   Urientation Set   Set from Database (sort by ▼   Save Current Set   Background   8 % |   |  |   |  |  |  |  |  |
| Fix Initial Parameters     Start Volume Fraction Calculation     Exit     Exit and Show  |   |  |   |  |  |  |  |  |

結晶方位群を登録し、解析時に指定すれば、サンプル間の比較が容易になる。

以下に同一条件で定量した4 s a m p l e の V o l u m e F r a c t i o n 結果があった場合

S a m p l e 1の結果

| 🛓 C   | DFVFG  | raph 1.113H   | T by CTR  |  |  |
|---|--|---|---|--|--|
| File  | Help   |   |   |  |  |
|   | Job  | JO B4   | Sample : sample   | e1 Project : VolumeFraction  |  |
| No.<br>1:<br>2:<br>3:<br>4:<br>5:<br>6:<br>7:<br>8:<br>9:<br>10:<br>11: | VF(%)<br>105<br>98<br>100<br>100<br>102<br>102<br>101<br>103<br>100<br>88<br>003 | Phi1(FWHM)<br>10.8<br>9.7<br>10.0<br>10.0<br>12.0<br>11.0<br>9.3<br>12.8<br>9.6<br>Background V | Phi(FWHM)     Phi       10.1     10.0       96     10.0       99     10.0       96     10.0       96     10.0       10.0     11.8       10.5     11.2       11.3     10.9       10.5     11.4       10.0     10.3       8.9     .95       folume     Fraction | 2(FWHM) Orientation<br>{ 1 1 0 K 0 0 1 > goss<br>{ 1 1 2 K 1 1 -1 > copper<br>{ 1 1 0 K 1 -1 2 > brass<br>{ 0 0 1 K 1 0 0 > cube<br>{ 1 3 2 K 6 -4 3 > S-1<br>{ 2 3 1 K 3 -4 6 > S-2<br>{ 2 1 3 K -3 -6 4 > S-3<br>{ 2 3 1 K -3 4 -6 > S-4<br>{ 0 0 1 K 5 2 0 > CR<br>{ 0 0 1 K 1 1 0 > RW |  |
|   |  |   |   |  |  |







と纏まりが悪い

そこで、以下のソフトウエアで纏めると



\_ 7 🗙

🕌 Volume Fraction Display





<sup>%</sup>表示も可能になるが、グラフの色は統一できない。

## 更に TextDisplay を用いると

| ≝ TextDisplay 1.002HT by CTR |        |       |      |      |      |      |      |  |
|------------------------------|--------|-------|------|------|------|------|------|--|
| File Help                    |        |       |      |      |      |      |      |  |
| Samplename goss              | copper | brass | cube | S-1  | S-2  | S-3  | S-4  |  |
| sample1.POD10.5              | 9.8    | 10.0  | 10.0 | 10.2 | 10.2 | 10.1 | 10.3 |  |
| sample2.POD26.2              | 14.3   | 10.0  | 10.1 | 5.1  | 7.2  | 6.5  | 6.3  |  |
| sample3.POD6.1               | 6.3    | 5.2   | 6.0  | 8.7  | 8.6  | 4.1  | 6.8  |  |
| sample4.POD10.0              | 15.1   | 15.1  | 10.5 | 5.1  | 5.1  | 4.1  | 3.2  |  |



