

方位データから極密度の計算

*HelperTex Office*

2021年07月13日

## 1. 概要

極密度を方位データから計算を行う場合、方位データからODF図を計算し、再計算極点図を計算すれば、可能になります。

方位データからODF図の計算はL a b o T x、M T E Xで計算できます。

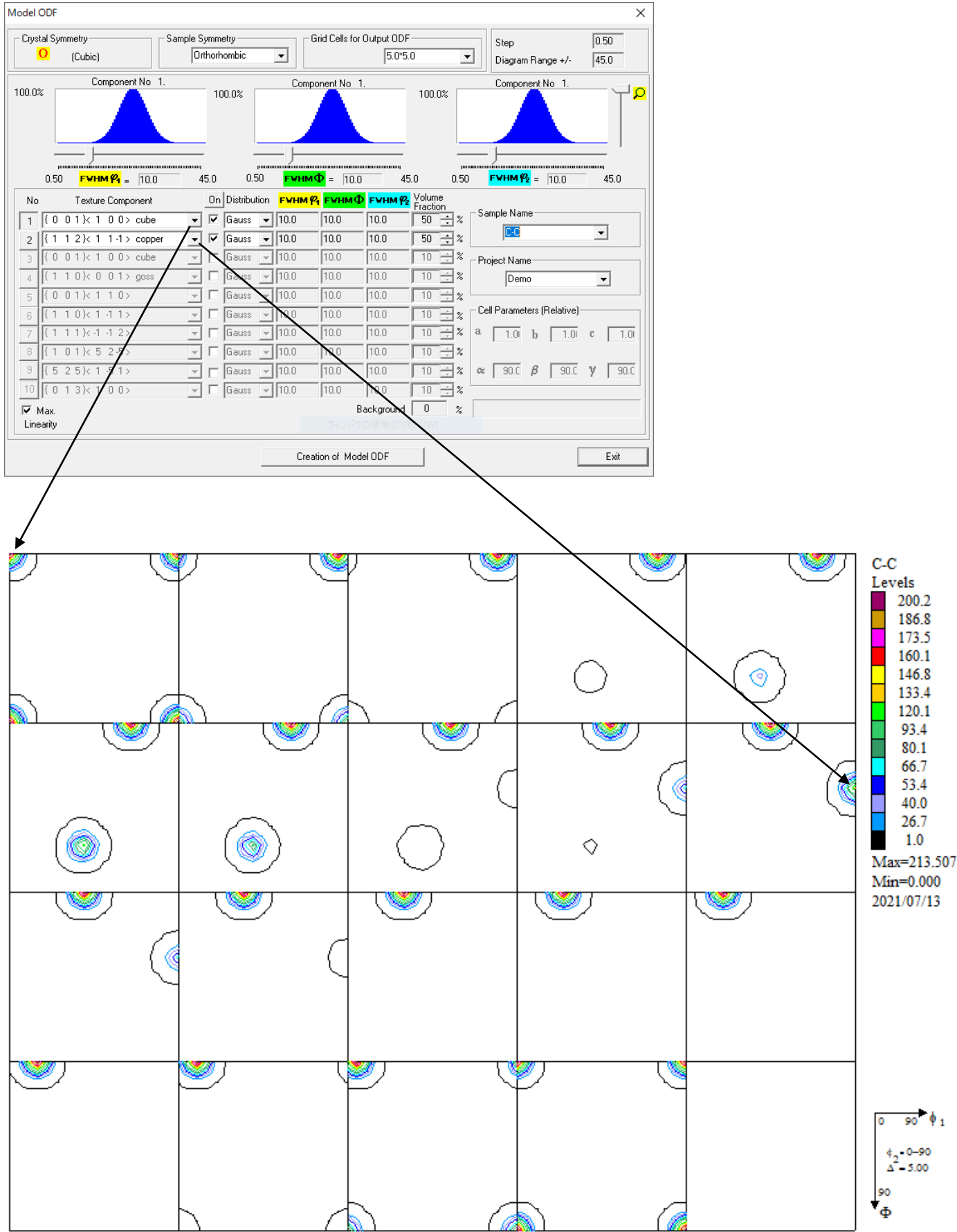
## 2. 方位データ（アルミニウム）

c u b e − 5 0 %

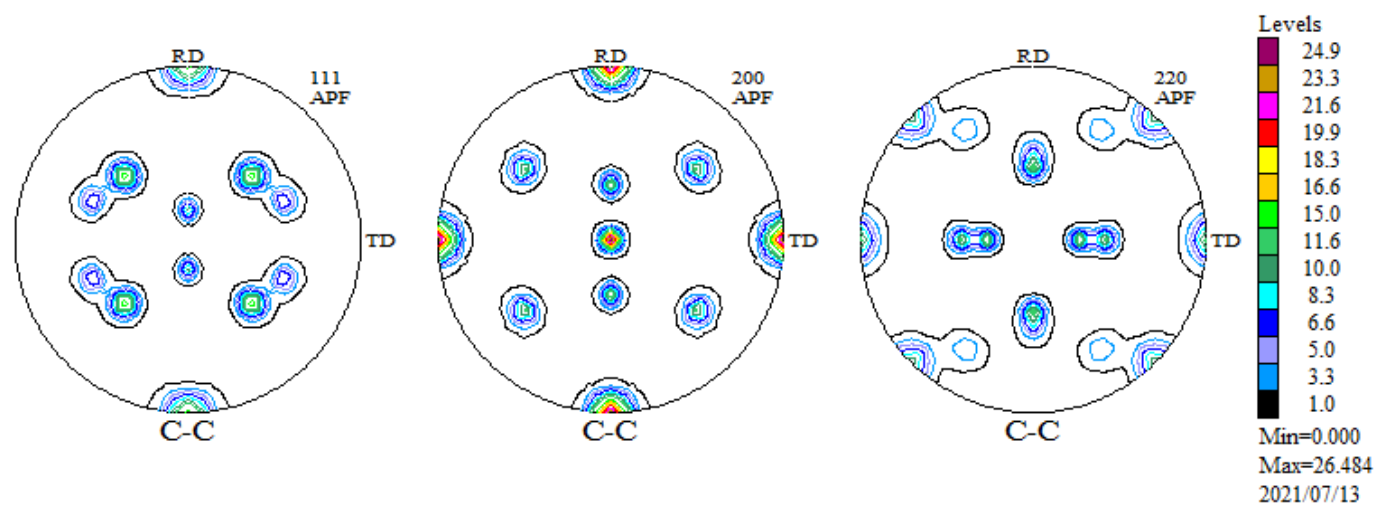
c o p p e r − 5 0 %とする。

### 3. LaboTexで作成

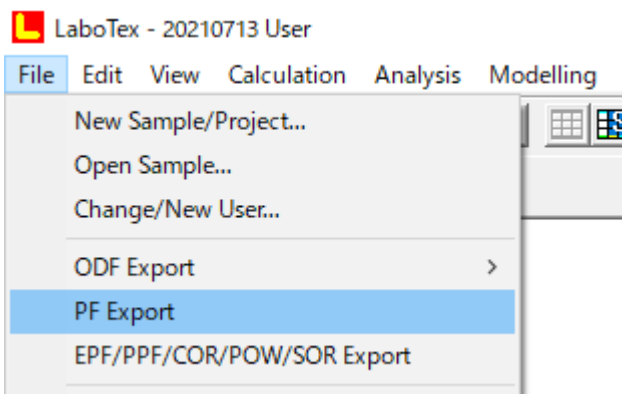
方位cubeとcopper 50%からODF図を計算



ODF 図から極点図を作成



極点図の E x p o r t

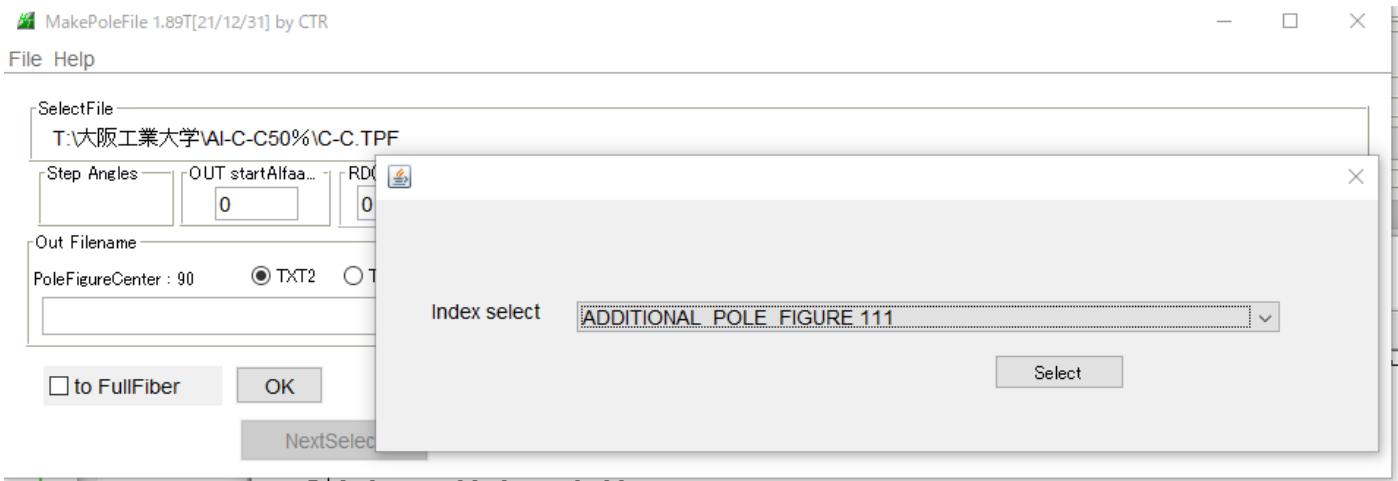


↓  
↓  
↓  
↓

ADDITIONAL POLE FIGURE

111.	0.0	5.0	10.0	15.0	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0	55.0
60.0	65.0	70.0	75.0	80.0	85.0	90.0	↓					
0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5.0	0.06	0.07	0.09	0.08	0.05	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02
0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10.0	1.00	1.05	1.16	1.15	0.86	0.50	0.33	0.25	0.17	0.10	0.05	0.02
0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15.0	7.47	6.76	5.23	3.89	2.84	1.65	0.75	0.38	0.22	0.10	0.03	0.01
0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	↓					

データの成形



{ 1 1 1 } 極点図 ( 9 0 , 9 0 ) に変換  
但し、極点図の中心を 9 0 とし、データ CCW 回転

$\alpha$ 、	$\beta$	極密度
0.0	0.0	16.34↓
0.0	5.0	10.37↓
0.0	10.0	2.81↓
0.0	15.0	0.36↓
0.0	20.0	0.03↓
0.0	25.0	0.0↓
0.0	30.0	0.0↓
0.0	35.0	0.0↓
0.0	40.0	0.0↓
0.0	45.0	0.0↓
0.0	50.0	0.0↓
0.0	55.0	0.0↓
0.0	60.0	0.0↓
0.0	65.0	0.0↓
0.0	70.0	0.0↓
0.0	75.0	0.0↓
0.0	80.0	0.0↓

#### 4. M T E X で解析

```
cs=crystalSymmetry('cubic')
ss=specimenSymmetry('triclinic')
ori1=orientation('Miller',[0,0,1],[1,0,0],cs,ss)
ori2=orientation('Miller',[1,1,2],[1,1,-1],cs,ss)
psi=vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)
```

cubicODF の計算

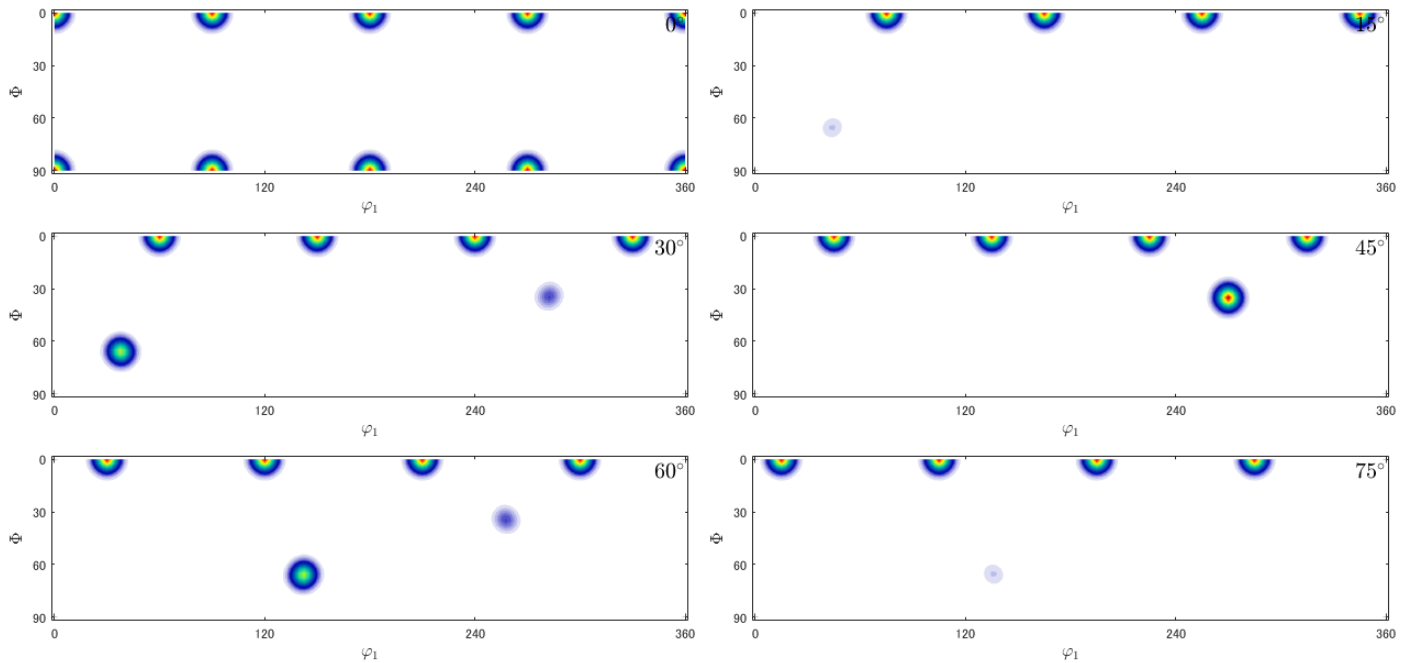
```
odf1=unimodalODF(ori1,psi)
```

copperODF の計算

```
odf2=unimodalODF(ori2,psi)
```

```
odf=odf1+odf2
```

```
plot(odf)
```

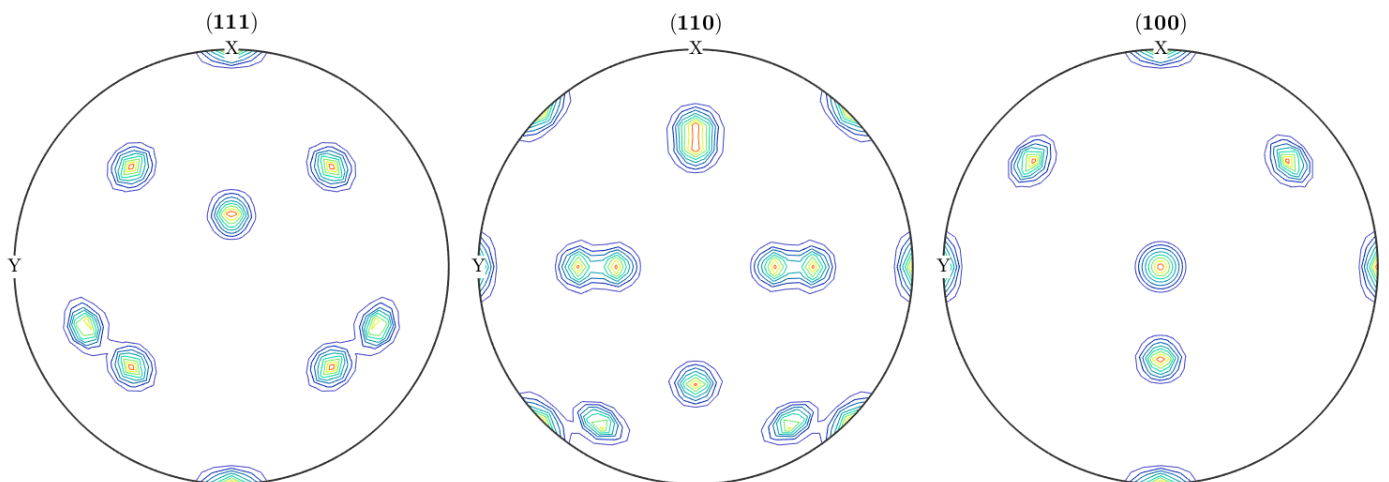


再計算極点図計算

```
h=[Miller(1,1,1,cs),Miller(1,1,0,cs),Miller(1,0,0,cs)]
```

```
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

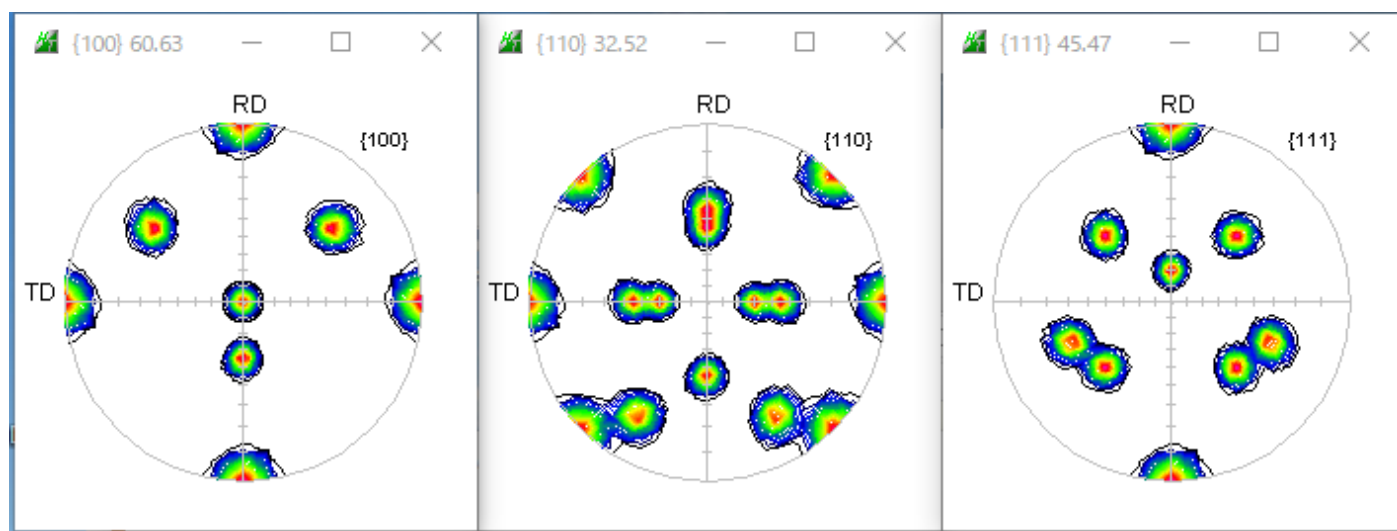
```
plot(rpf,'contour')
```



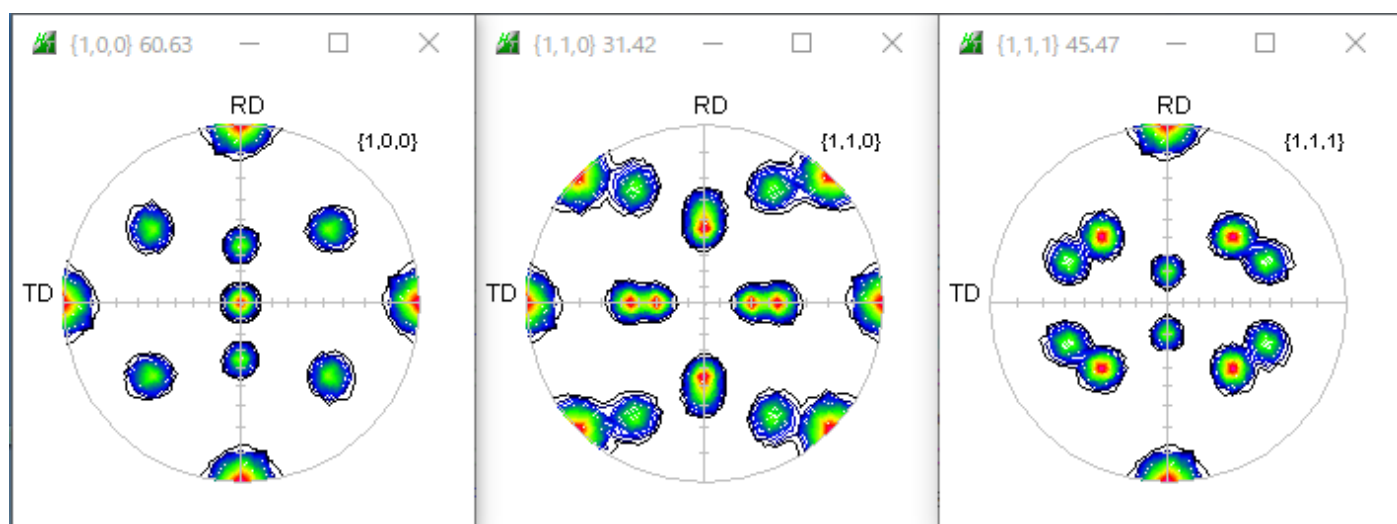
ss=specimenSymmetry('triclinic')を('orthorhombic')で計算すれば 1/4 対称になるが、ODF データが欠落

極点図をE X p o r t

E x p o r tしたデータをCTRで描画



CTRで1／4対称操作



テキストデータ

M T E X

L a b o T e x

0.0	0.0	45.472278↓	0.0	0.0	16.34↓
0.0	5.0	22.759743↓	0.0	5.0	10.37↓
0.0	10.0	2.8685348↓	0.0	10.0	2.81↓
0.0	15.0	0.092911355↓	0.0	15.0	0.36↓
0.0	20.0	5.7185126E-4↓	0.0	20.0	0.03↓
0.0	25.0	1.2650198E-4↓	0.0	25.0	0.0↓
0.0	30.0	0.0↓	0.0	30.0	0.0↓
0.0	35.0	0.0↓	0.0	35.0	0.0↓
0.0	40.0	1.42371E-4↓	0.0	40.0	0.0↓
0.0	45.0	0.0↓	0.0	45.0	0.0↓
0.0	50.0	0.0↓	0.0	50.0	0.0↓
0.0	55.0	0.0↓	0.0	55.0	0.0↓
0.0	60.0	0.0↓	0.0	60.0	0.0↓
0.0	65.0	2.1026772E-4↓	0.0	65.0	0.0↓
0.0	70.0	0.0↓	0.0	70.0	0.0↓
0.0	75.0	1.5917087E-4↓	0.0	75.0	0.0↓
0.0	80.0	0.0↓	0.0	80.0	0.0↓
0.0	85.0	5.7220273E-4↓	0.0	85.0	0.0↓
0.0	90.0	0.0↓	0.0	90.0	0.0↓

## 5. 考察

MTEXの半価幅を5deg、LaboTexは10degで計算しています。

Harmonic法では、オーバーシュートのゴーストが現れるが、ADC法ではゴーストなし  
しかし、MTEXは無料で使える。

MTEXはMTEX画面にコマンド入力になり操作性に難があります。

入力データでは、

MTEX指数で入力のため、Euler角度から指数変換を行う。

これは、CTRソフトウェアでサポートしています。

Mgのeuler角度指数変換

The screenshot shows the 'HexaConvert 1.11ST[21/12/31] by CTR' window. It features a menu bar with 'File', 'Step', and 'Help'. The main interface is divided into several sections:

- Axis Selection:** Two diagrams show the X-axis for different Miller notations. Option A is 'X-Axis[100] ([2-1-10])' with an unchecked checkbox. Option B is 'X-Axis[210] ([10-10])' with a checked checkbox.
- Miller Notation (3Axis Notation):** A section with three input fields (0, 1, 4) and three output fields (-2, -4, 1). Buttons for 'hkl' and 'uvw' are present.
- Miller Bravais Notation(4 Axis Notation):** A section with four input fields (0, 1, -1, 4) and four output fields (0, -2, 2, 1). Buttons for 'hkil' and 'uvxw' are present.
- Euler(p1Fp2):** A section with a checked checkbox and three input fields: 90.0, 24.627, and 30.0.
- Material select:** A dropdown menu showing 'Magnesium.TXT'.
- Calculation Parameters:** A section with 'c/a' (1.624), 'Input ψ2 Angles' (30.0), and a 'Calc' button.
- DISP:** A section with 'Position' (10), 'BG Corr' (Black), 'Disp size' (200), 'Line size' (1.0), and buttons for 'DISP' and 'MINUS'.
- Buttons:** 'OK' and 'Return Structure' buttons are at the bottom.



## 6. 追加

copper Euler 角度 (90.0,35.26,45.0) から極密度の計算

LaTeX の場合

Euler 角度を database に登録

**Orientations Type Database**

Crystal Symmetry Systems: Cubic Number of Orientations: 23

Database

No	Orientation Type Name	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$
15	{ 1 1 1 } < 0 1 -1 >	-120.00	54.74	45.00
16	{ 1 1 2 } < 1 -1 0 >	0.00	35.26	45.00
17	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 >	-46.91	36.70	26.57
18	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R	-46.91	36.70	26.57
19	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	27.03	57.69	18.43
20	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	52.87	74.50	33.69
21	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	58.98	36.70	63.43
22	{ 2 3 1 } < -3 4 -6 > S-4	-127.13	74.50	33.69
23	{ 1 90.00, 35.26, 45.00 } copper	90.00	35.26	45.00

Delete Edit New New {HKL}<UVW>

Orientation Euler Angles

☐ Fiber

Orientation Type Name: { 90.00, 35.26, 45.00 } Name: copper2

Angle Part:  $\varphi_1$   $\Phi$   $\varphi_2$   
 Name: (-360 - 360) (-180 - 180) (-360 - 360)  
 { 90.00, 35.26, 45.00 } copper2 90.00 35.26 45.00

Add/Change Cancel

Close

登録した DataBase の Euler 角度から方位密度計算

**Model ODF**

Crystal Symmetry: Cubic Sample Symmetry: Orthorhombic Grid Cells for Output ODF: 5.0\*5.0 Step: 0.50 Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 1. 100.0% FWHM  $\varphi_1$  = 10.0 FWHM  $\Phi$  = 10.0 FWHM  $\varphi_2$  = 10.0

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\varphi_1$	FWHM $\Phi$	FWHM $\varphi_2$	Volume Fraction
1	{ 90.00, 35.26, 45.00 } copper2	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	100 %
2	{ 1 1 2 } < 1 -1 -1 > copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
3	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
4	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
5	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 1 1 1 } < -1 -1 2 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

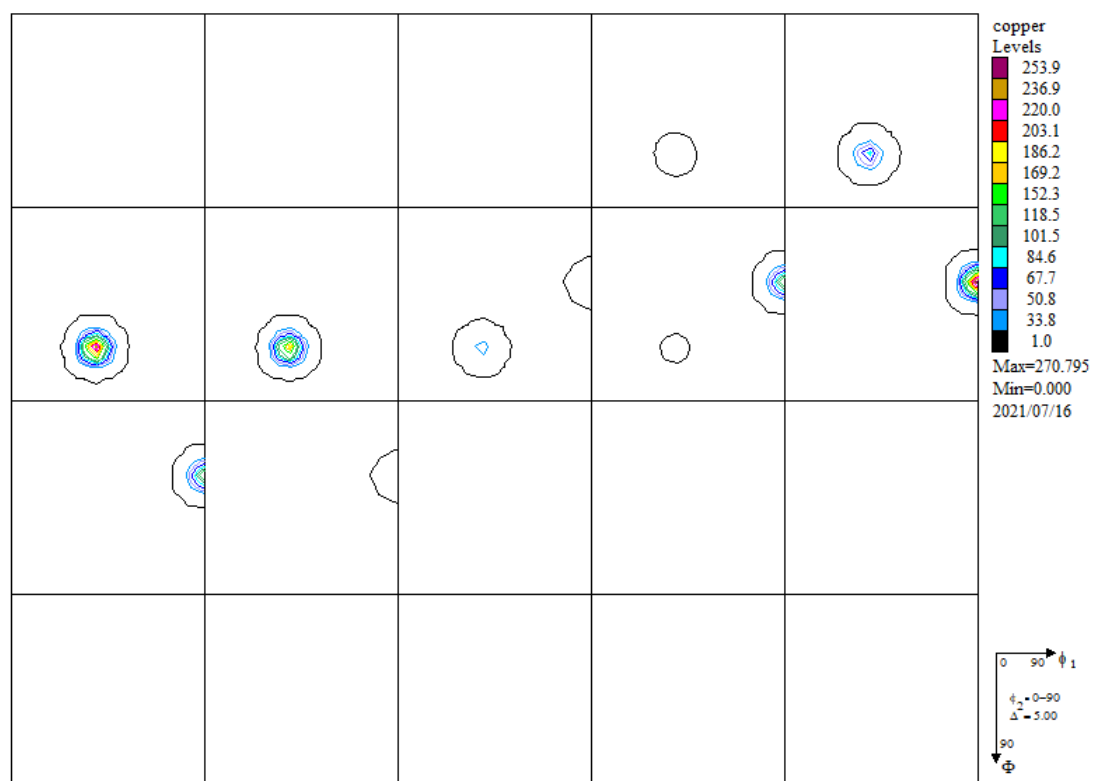
☒ Max. Linearity Background: 0 %

Sample Name: copper Project Name: Demo

Cell Parameters (Relative):  
 a: 1.0 b: 1.0 c: 1.0  
 $\alpha$ : 90.0  $\beta$ : 90.0  $\gamma$ : 90.0

Creation of Model ODF Exit

## 方位密度



## 方位密度から極密度計算

Additional Pole Figures (APF) Calculation

Choose APF hkl for Calculation

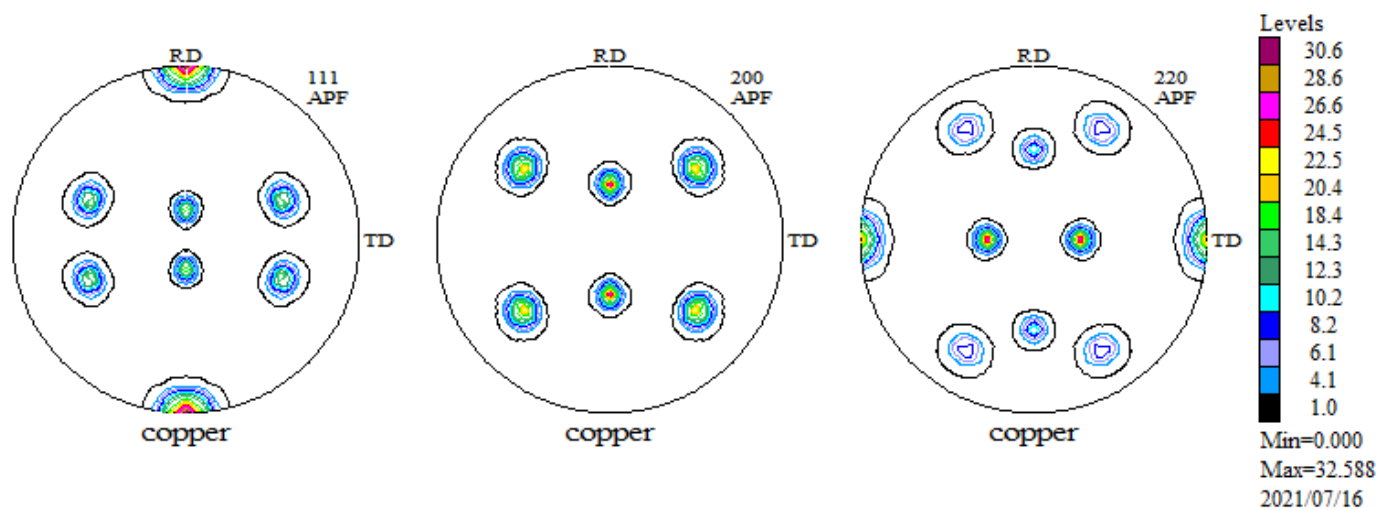
h: 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9  
k: 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9  
l: 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9

APF hkl: 220

Calculated APF hkl: 111 200 220

Calculation Progress (100.0 %)

START APF CALCULATION END



## MT E Xの場合

CrystalOrientationDisp 2.05ST[21/12/31] by CTR

File Help Symmetry Special Index

Material

Material Cubic Aluminum

1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0

Miller Indices

(hkl)[uvw] 1 1 2 -1 -1 1 Calc

Euler Angle

(p1 P p2) <=90 90.0 35.2644 45.0 Calc

Present Condition

Euler Angle

90.0 35.2644 45.0

Double Miller Indices

0.4082 0.4082 0.8165 -0.5774 -0.5774 0.5774

DISP

Position 10 Disp size 400 DISP

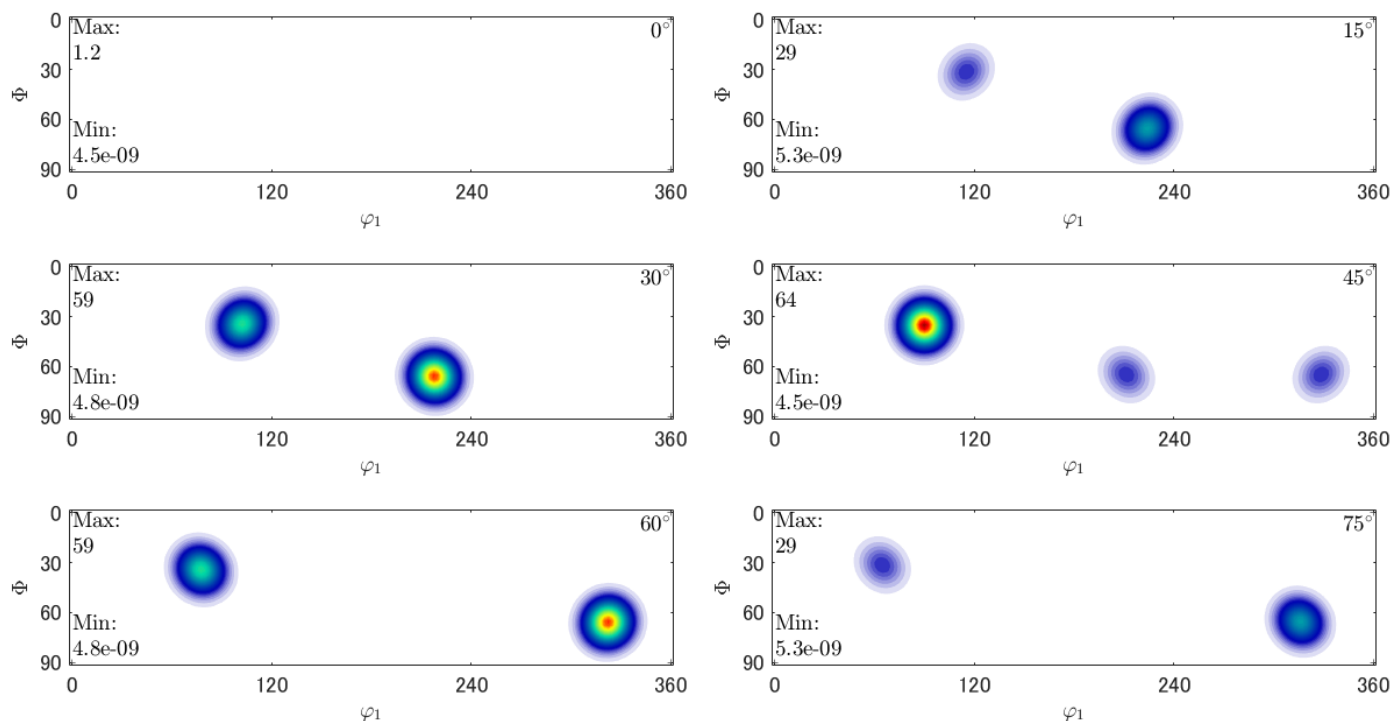
BG color Black Line size 2.0 Minus

OK Return Structure

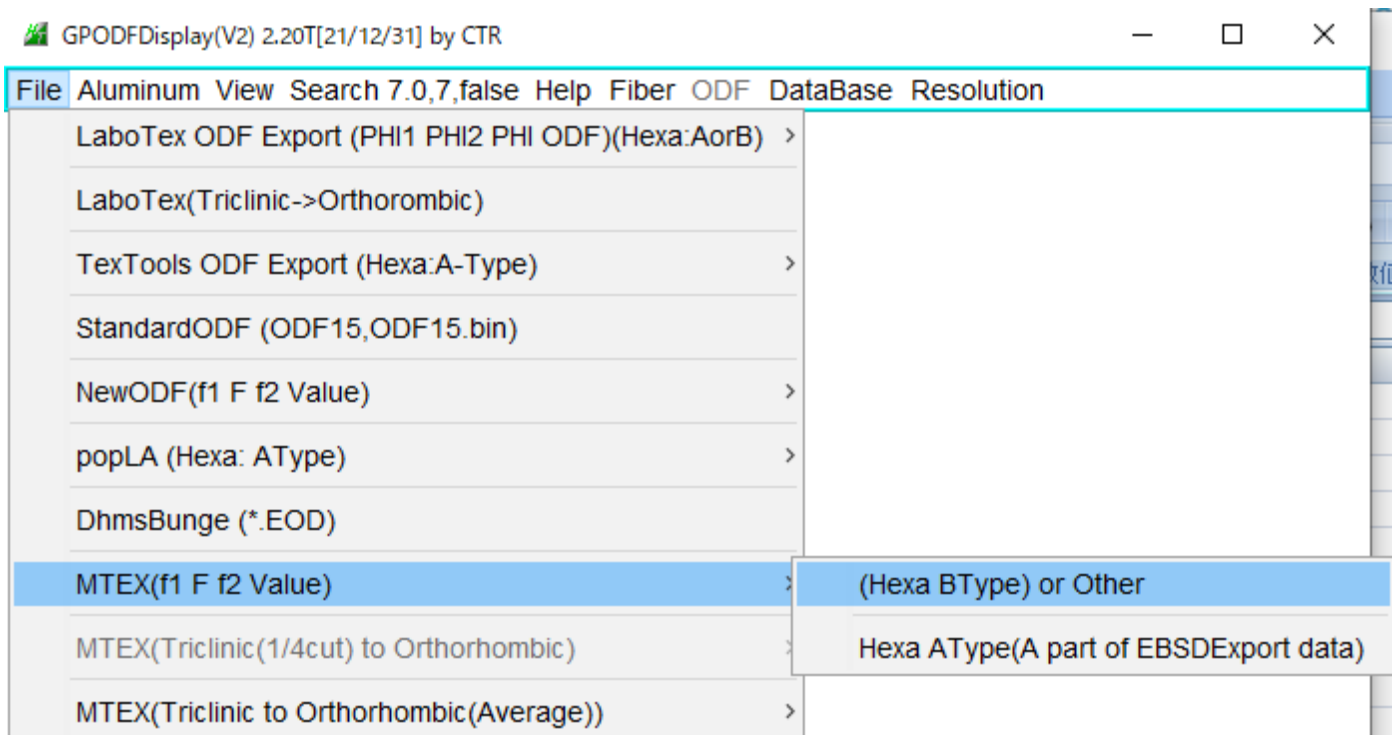
E u l e r 角度から指数に変更し、従来の方法で方位密度を計算する。

MTEX 5.7.0では

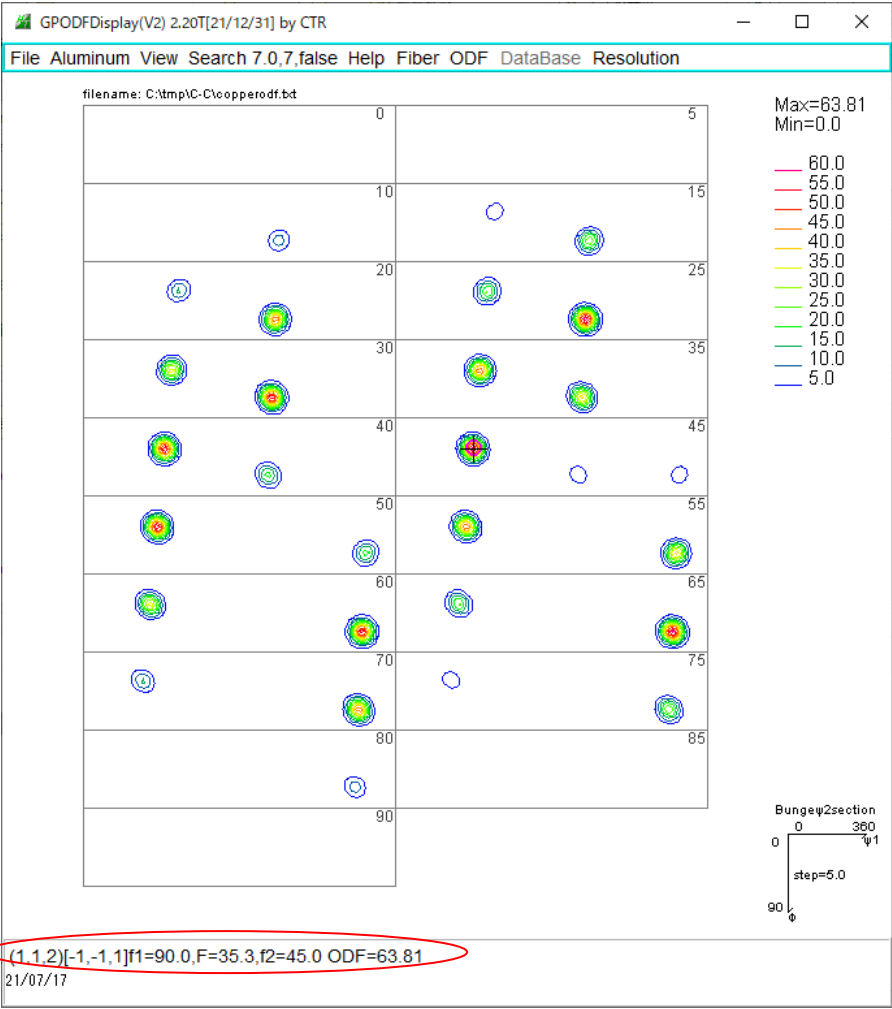
```
cs=crystalSymmetry('cubic')
ss=specimenSymmetry('triclinic')
ori=orientation.byEuler(90*degree,35.26*degree,45*degree,cs,ss)
psi=vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',10*degree)
odf=unimodalODF(ori,psi)
```



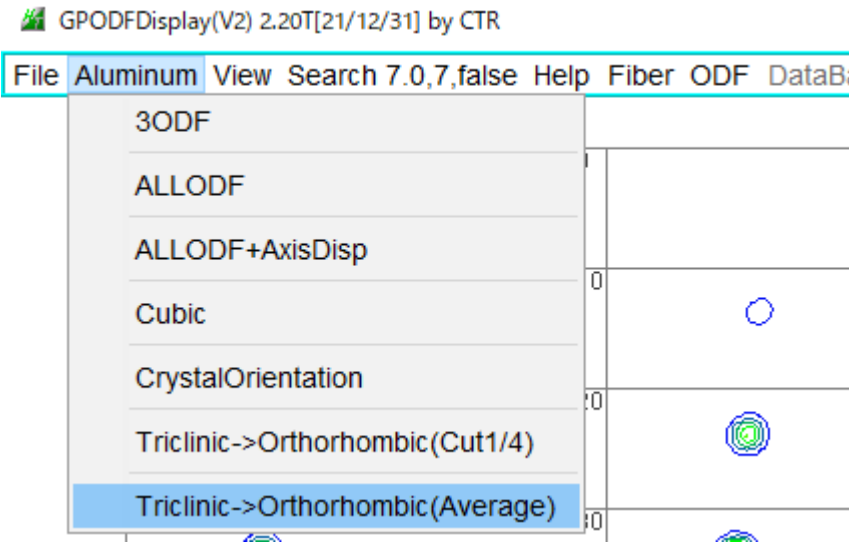
Triclinic では、 $\phi_1=360$  データ欠落するが、対称性から計算可能であるが、Orthorhombic では、 $\phi_1=90$  データが欠落するので、Orthorhombic は不適當 ODF データを Export し、CTR にて、Triclinic->Orthorhombic 操作を行う。



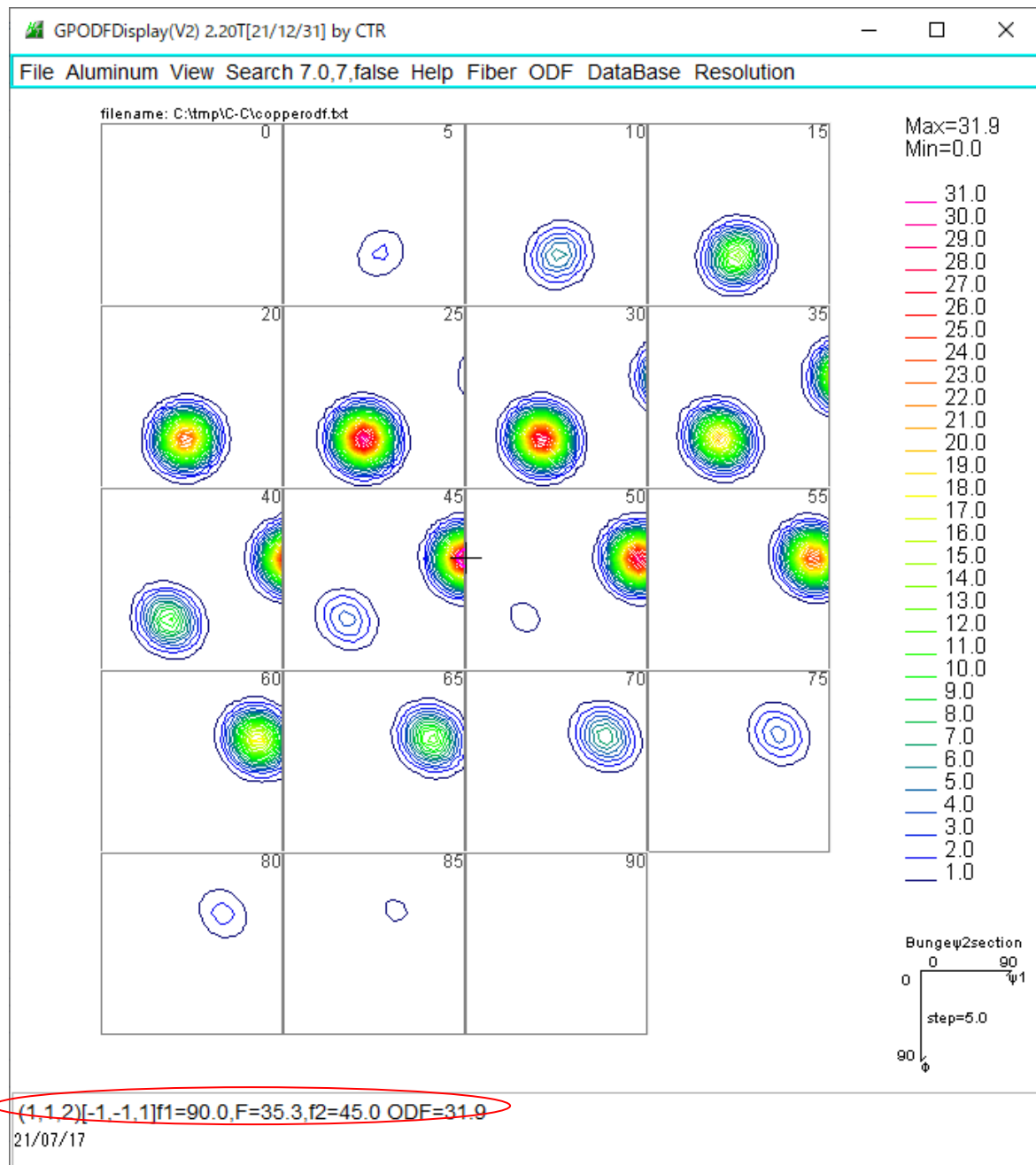
E X p o r t データ表示



Triclinic->Orthorhombic



Triclinic→Orthorhombicで得られたODF図



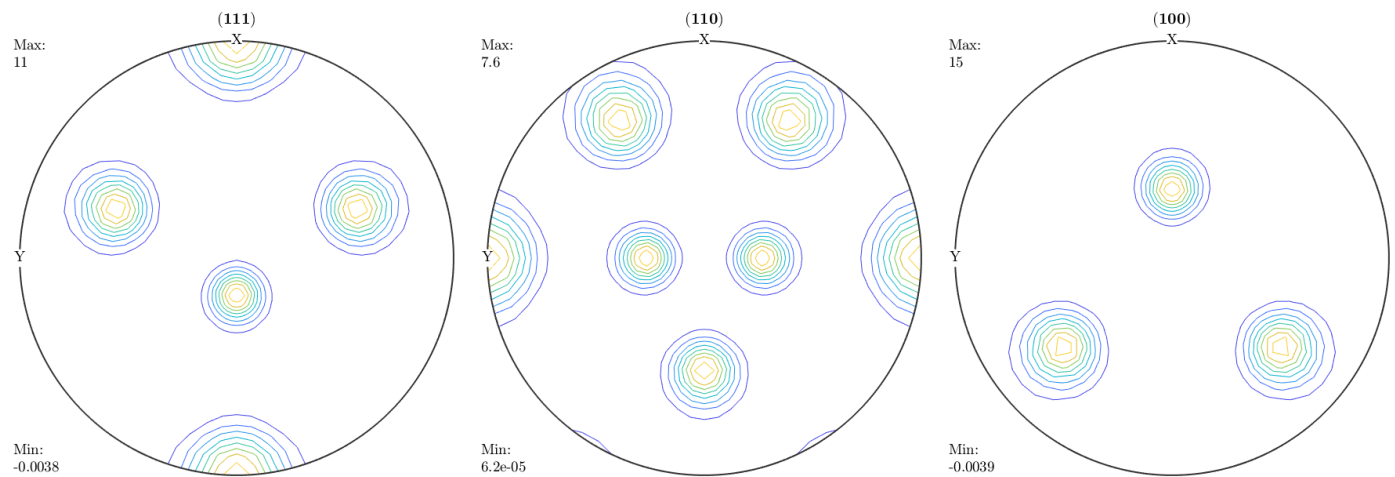
Phi 1 = 90 データは正常表示されます。(MTEXのOrthorhombicでは表示されない)  
HALFWIDTH = 10 deg で計算すると、プロファイルが広がっています。  
最大方位密度はTriclinicとOrthorhombicで異なります。

極密度計算

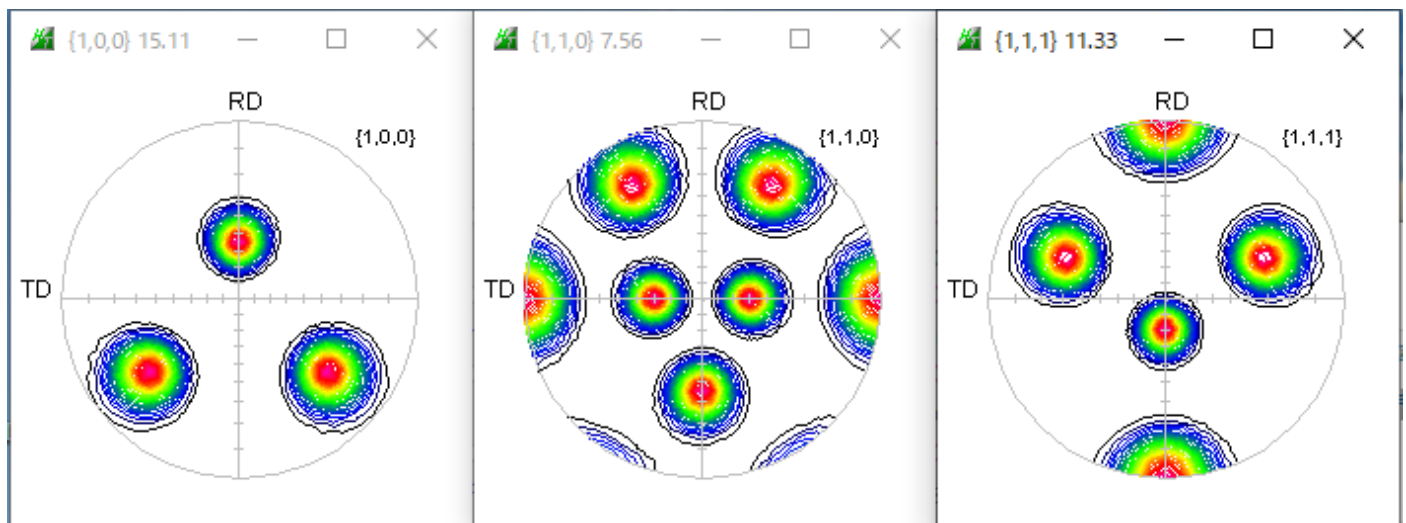
```
h=[Miller(1,1,1,cs),Miller(1,1,0,cs),Miller(1,0,0,cs)]
```

```
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

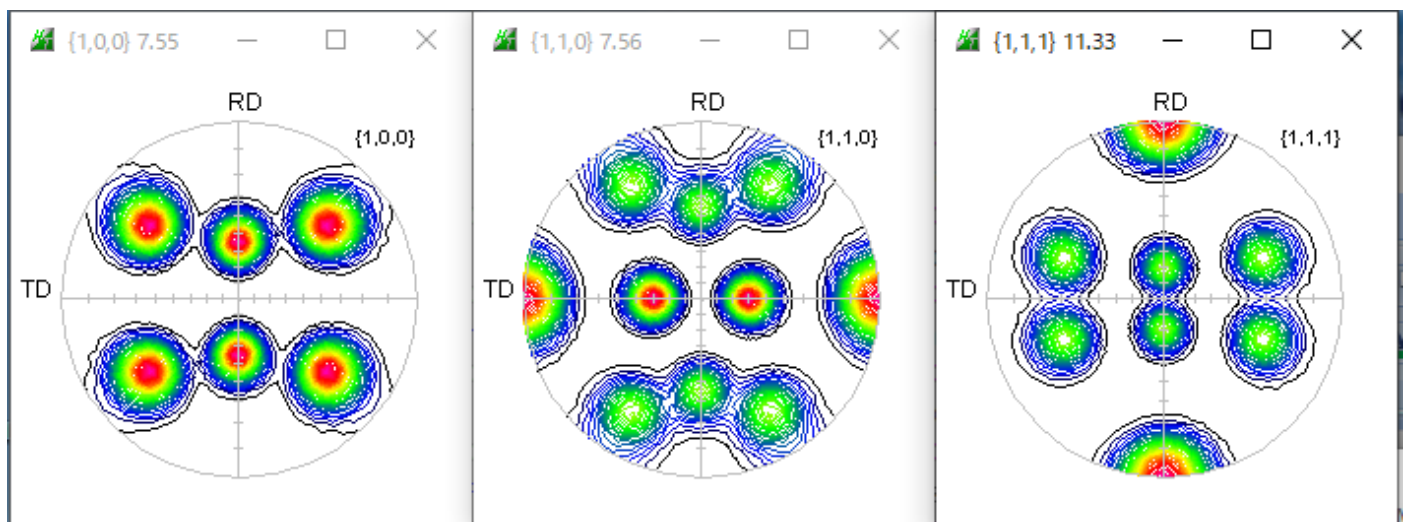
```
plot(rpf,'contour','projection','eangle')
```



E X p o r t した極点図



O r t h o r h o m b i c 化した極点図

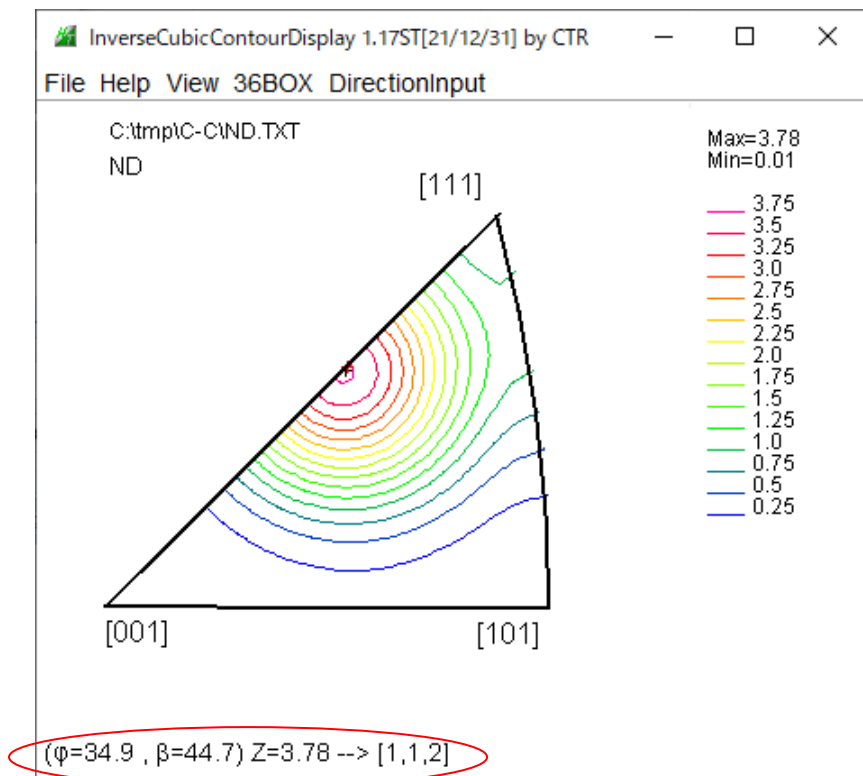


逆極点方位密度 (exp<sub>prt</sub>IPDF)は CTR の MTEX にパスを設定する)

```
exportIPDF(odf,zvector,'ND.TXT')
```

```
exportIPDF(odf,xvector,'RD.TXT')
```

ND



RD

