

ODF 解析結果から結晶方位の決定

測定格子点からずれる S 方位などの結晶方位を正確に求めるには、極点図測定間隔は、狭くする必要があります。

2016年06月02日

HelperTex Office

MeasureData¥VolumeFraction

概要

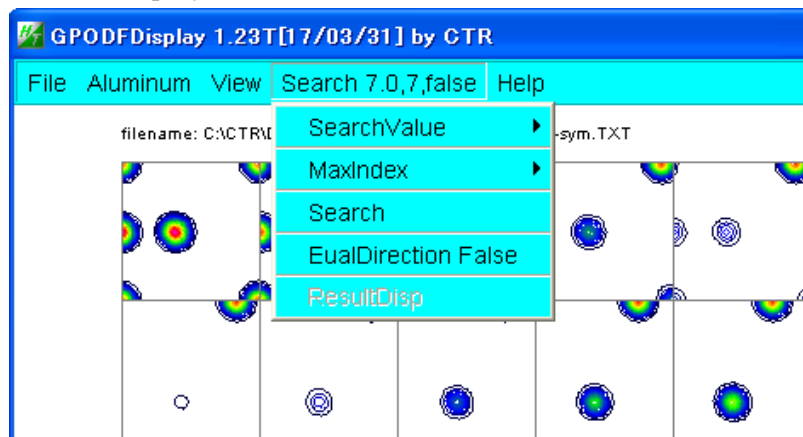
極点測定データから各種補正を行い、各種 ODF 解析ソフトウェアで ODF 解析を行い、ODF 図の描画を行うことは簡単な操作で可能であるが、その ODF 図から結晶方位の決定は簡単ではありません。Cubic では、cube,copper,brass,goss,S,R など有名な方位がありますが、ODF 図ではこの方位からずれた方位や、他の結晶方位が存在しています。本、資料では、ODF 図から自動的に結晶方位を決定する事を目的としたソフトウェアの説明を行います。入力データは、LaboTex,TeXTools,StandardODF,popLA などの ODF 図とします。対象となる結晶系は、Cubic,Hexagonal,Tetragonal,Orthorombic とします。

結晶方位の決定方法

1. ODF 図格子点の方位密度が、指定される方位密度より大きい位置をピーク位置とします。
2. 格子位置から、放物線近似による Euler ($\phi 1, \Phi, \phi 2$) 角度決定
3. Euler 角度から結晶方位(hkl)[uvw]決定
4. 等価な結晶方位を纏める。

ソフトウェアの実現

GPODFDisplay に結晶方位サーチ機能を追加



SearchValue

最小結晶方位密度の指定

MaxIndex

計算する最大指数の指定、計算上矛盾する場合、最大指数以上で計算

Search

結晶方位を決定して、ODF 図に赤○を表示

等価な結晶方位も表示

EqualDirection

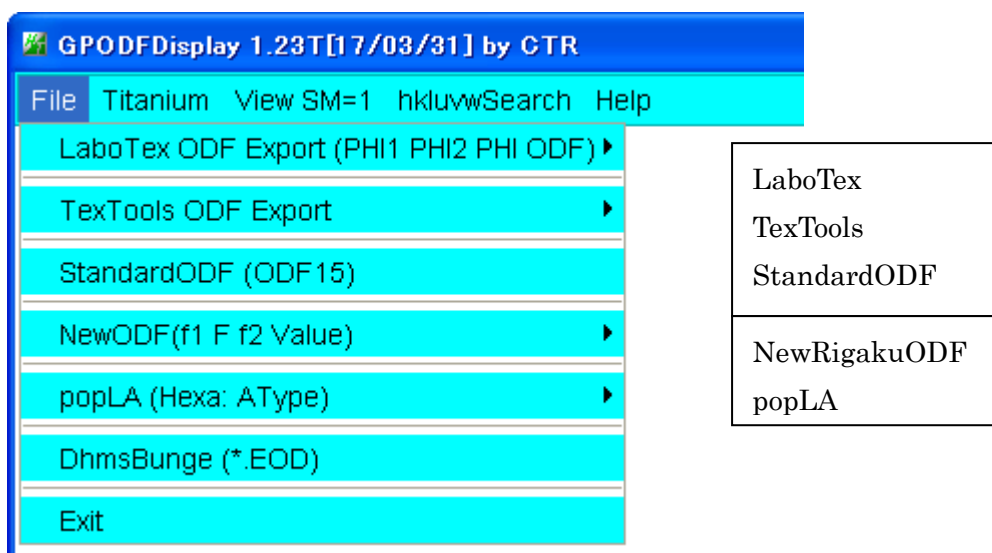
等価な結晶方位は複数存在します。

複数存在しない検出方位を削除する。

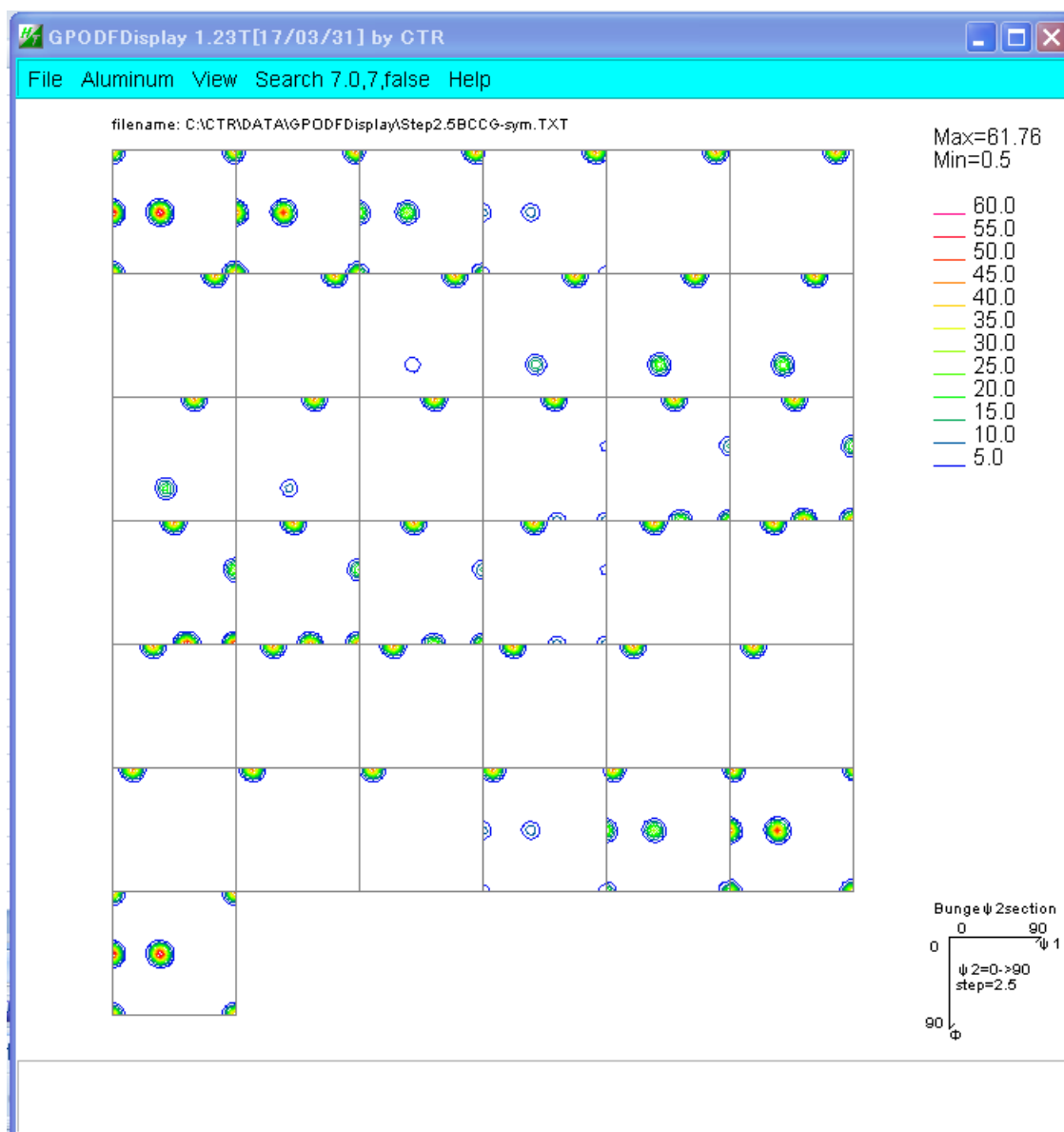
ResultDisp

等価な結晶方位を除いた結晶方位リストを表示

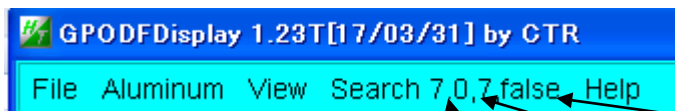
ODF 図の読み込み



demoデータの読み込み

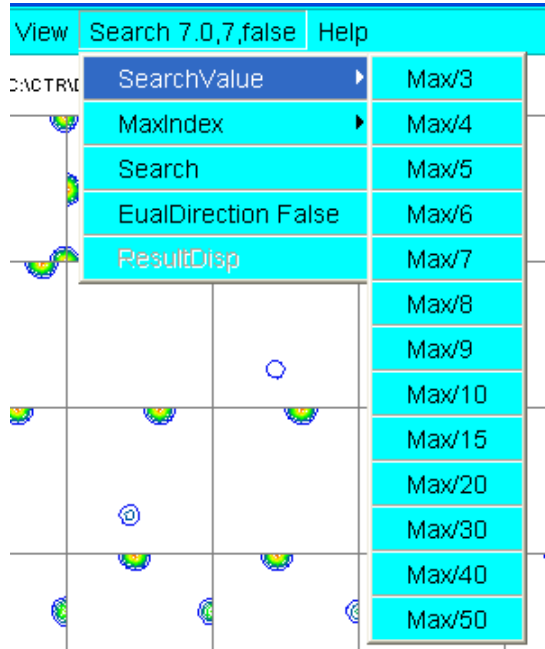


結晶方位のサーチ条件（標準条件）

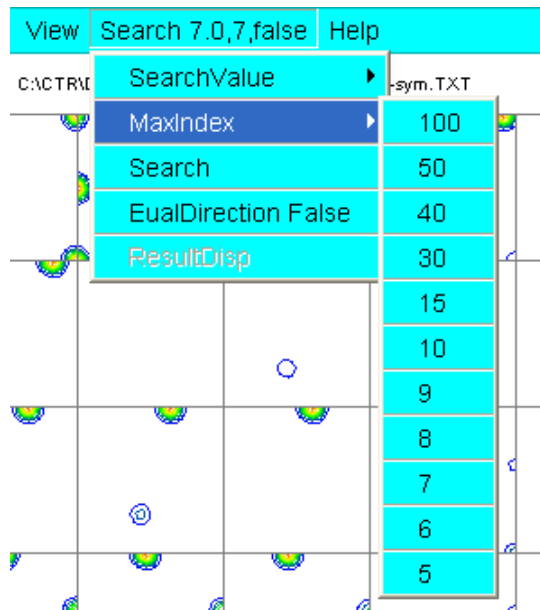


最小結晶方位密度指定 (Max/7.0) 最大指数 等価結晶方位条件なし

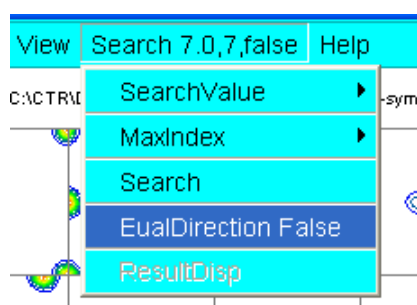
最小結晶方位密度指定



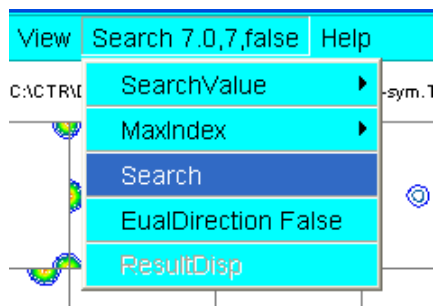
最大指数指定



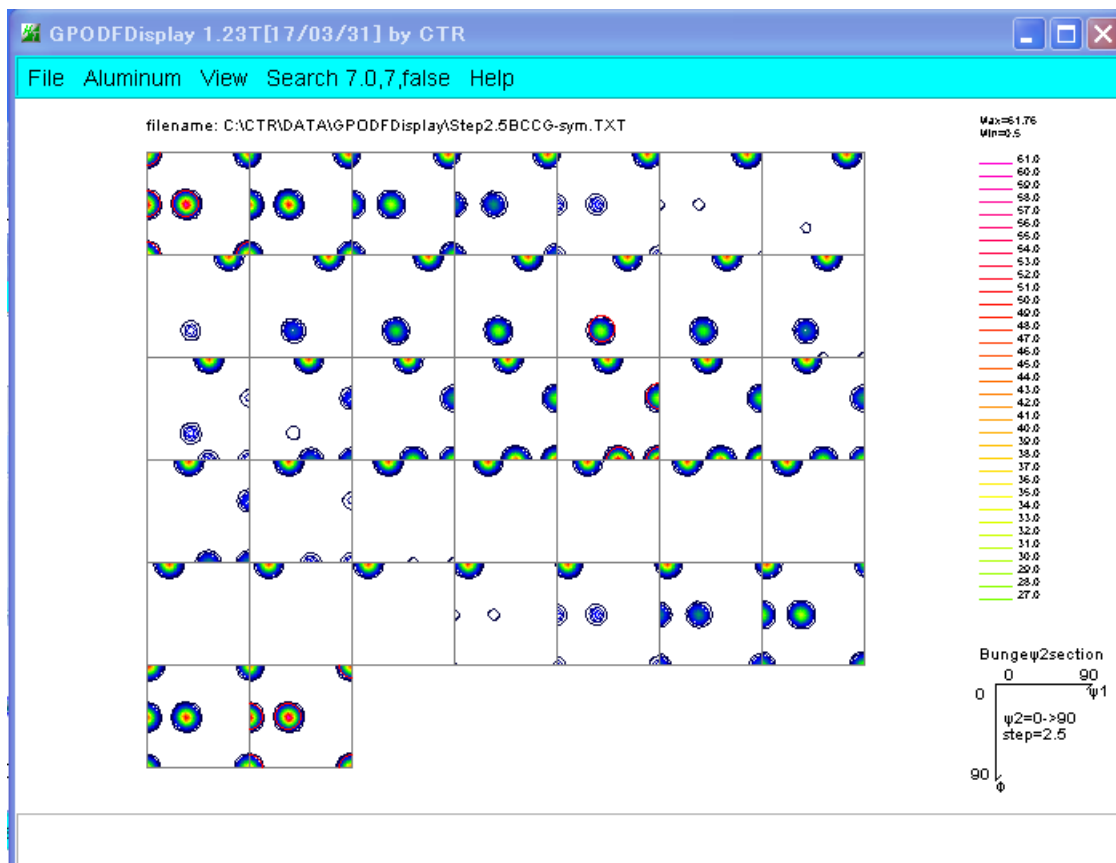
等価結晶方位モード指定



計算開始



計算結果 (赤○部分)



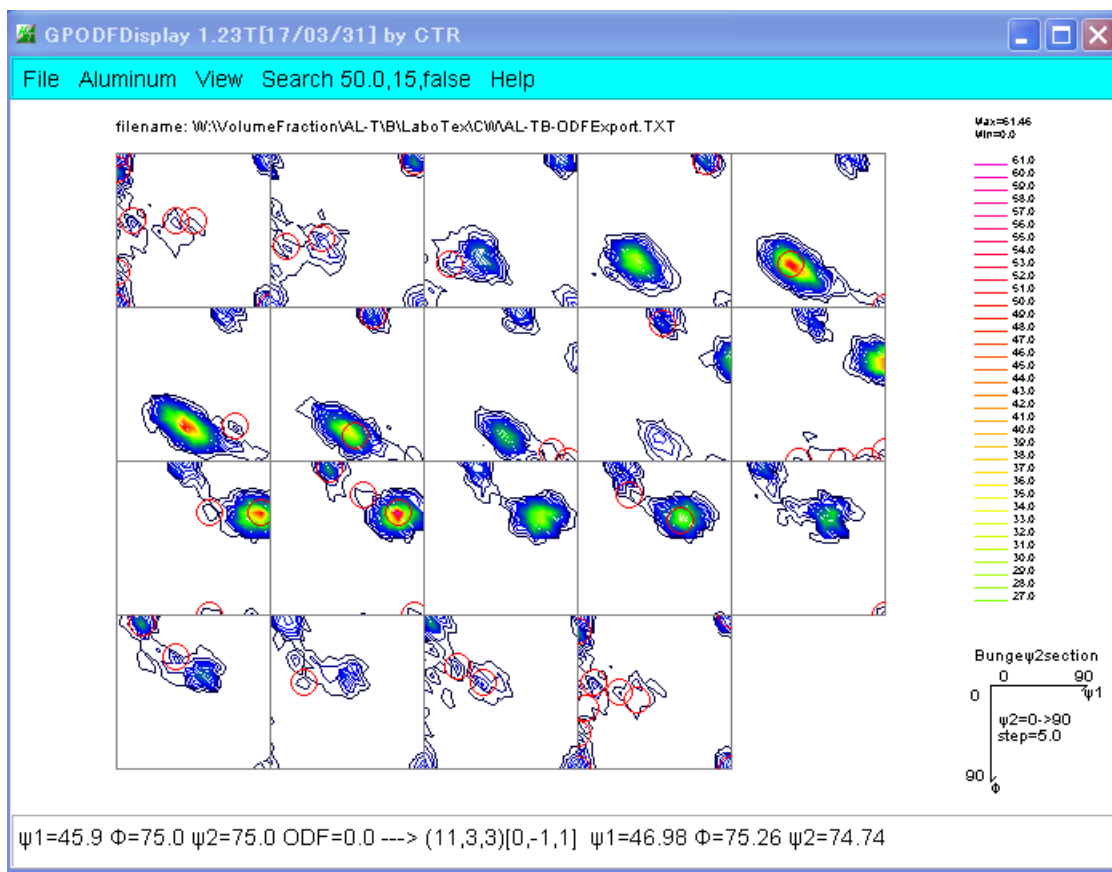
f1	F	f2	ODF	calc1	calcF	calc2	hkluvw	EqualDirection
0.0	0.0	0.0	49.4	0.0	0.0	0.0	(0 0 1)[1 0 0] cube	6
0.0	45.0	0.0	61.8	0.0	45.0	0.0	(0 1 1)[1 0 0] goss	3
35.24	45.0	0.0	61.6	35.26	45.0	0.0	(0 1 1)[2 -1 1] brass	3
39.27	65.87	26.6	29.4	39.23	65.91	26.57	(1 2 1)[1 -1 1] copper	2

計算結果リスト ODF 図から求めた Euler 角度と ODF

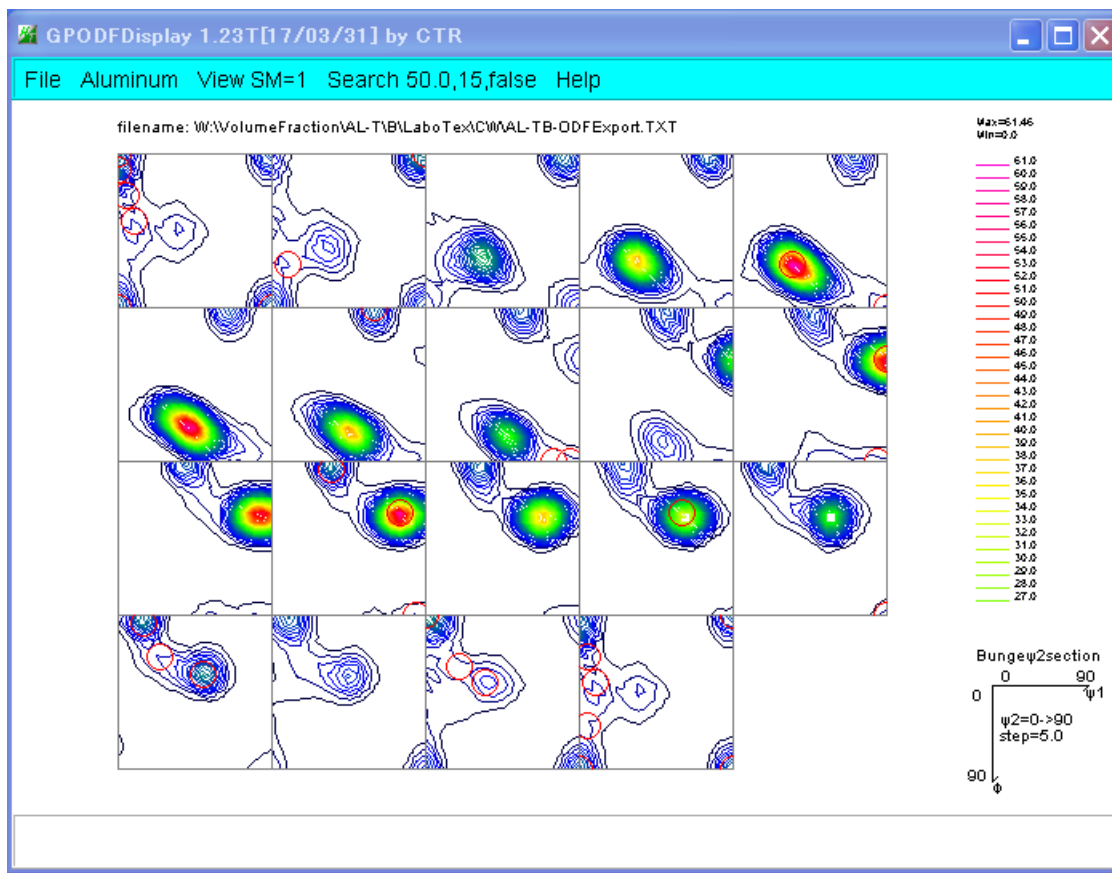
Euler 角度から求めた結晶方位と多重度

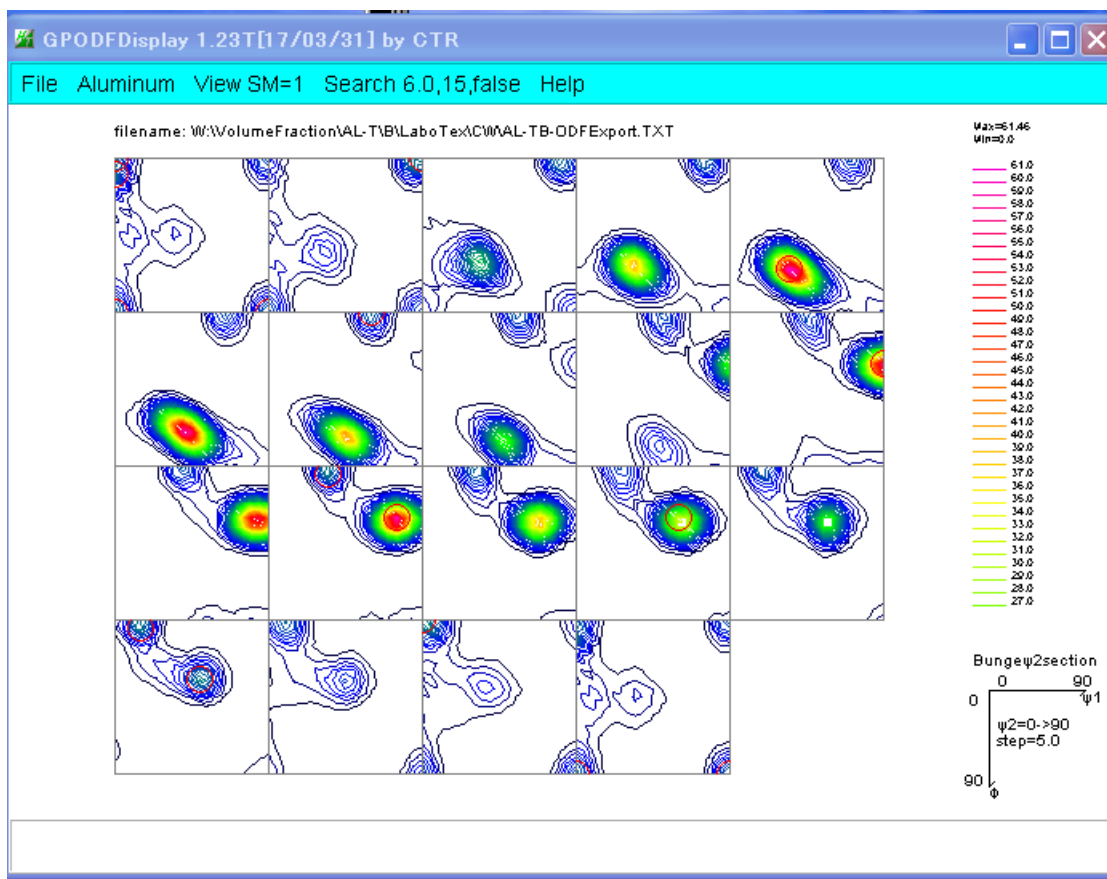
結晶方位から計算した Euler 角度

実測データ (最小方位密度 1/50)



平滑化





解析結果

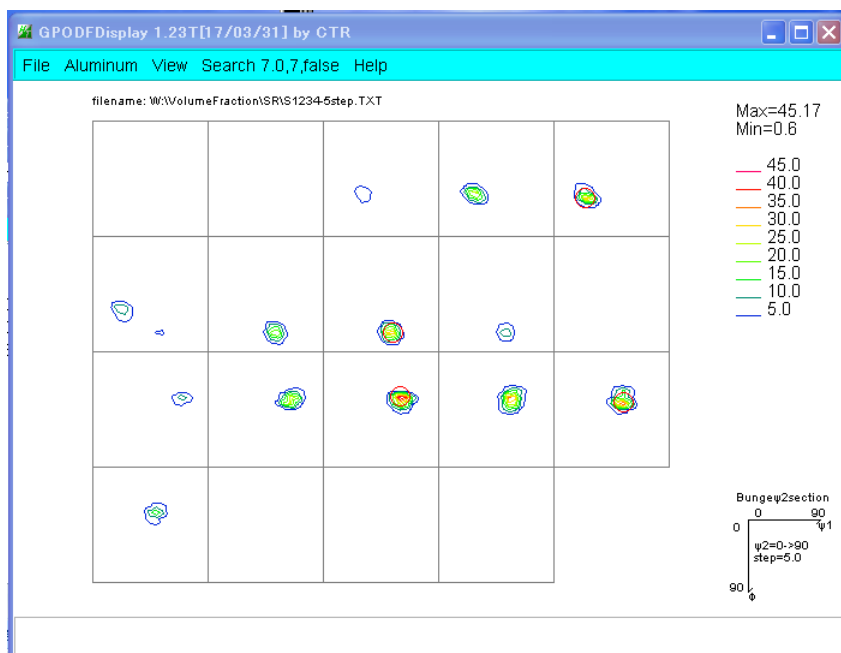
f1	F	f2	ODF	calcf1	calcF	calcf2	hkluvw	EqualDirection
0.0	0.0	0.0	11.3	0.0	0.0	0.0	(0 0 1)[1 0 0] cube	8
0.0	0.0	86.67	12.6	86.63	0.0	0.0	(0 0 1)[1 -17 0]	1
0.0	8.73	0.0	11.8	0.0	8.75	0.0	(0 2 13)[1 0 0]	1
36.42	64.86	20.33	61.5	25.53	64.91	20.56	(3 8 4)[8 -5 4]	1
50.8	34.28	73.49	12.3	49.8	32.31	71.57	(3 1 5)[-1 -2 1]	1
61.99	32.2	64.78	32.3	56.79	29.21	63.43	(2 1 4)[-1 -2 1]	1
75.07	31.26	54.68	60.3	83.03	31.22	45.0	(3 3 7)[-3 -4 3]	1
90.0	0.0	3.74	12.1	86.19	0.0	0.0	(0 0 1)[-1 -15 0]	1
90.0	31.57	46.21	55.8	90.0	35.26	45.0	(1 1 2)[-1 -1 1] copper	1

copper,brass,goss,S,R などからずれています。

最大 Index を制限しても同じ

f1	F	f2	ODF	calcf1	calcF	calcf2	hkluvw	EqualDirection
0.0	0.0	0.0	11.3	0.0	0.0	0.0	(0 0 1)[1 0 0] cube	8
0.0	0.0	86.67	12.6	86.63	0.0	0.0	(0 0 1)[1 -17 0]	1
0.0	8.73	0.0	11.8	0.0	8.75	0.0	(0 2 13)[1 0 0]	1
36.42	64.86	20.33	61.5	43.97	64.12	14.04	(1 4 2)[4 -3 4]	1
50.8	34.28	73.49	12.3	49.8	32.31	71.57	(3 1 5)[-1 -2 1]	1
61.99	32.2	64.78	32.3	56.79	29.21	63.43	(2 1 4)[-1 -2 1]	1
75.07	31.26	54.68	60.3	80.79	35.8	56.31	(3 2 5)[-1 -1 1]	1
90.0	0.0	3.74	12.1	86.19	0.0	0.0	(0 0 1)[-1 -15 0]	1
90.0	31.57	46.21	55.8	90.0	35.26	45.0	(1 1 2)[-1 -1 1] copper	1

単独の S 方位（5 度間隔）で確認



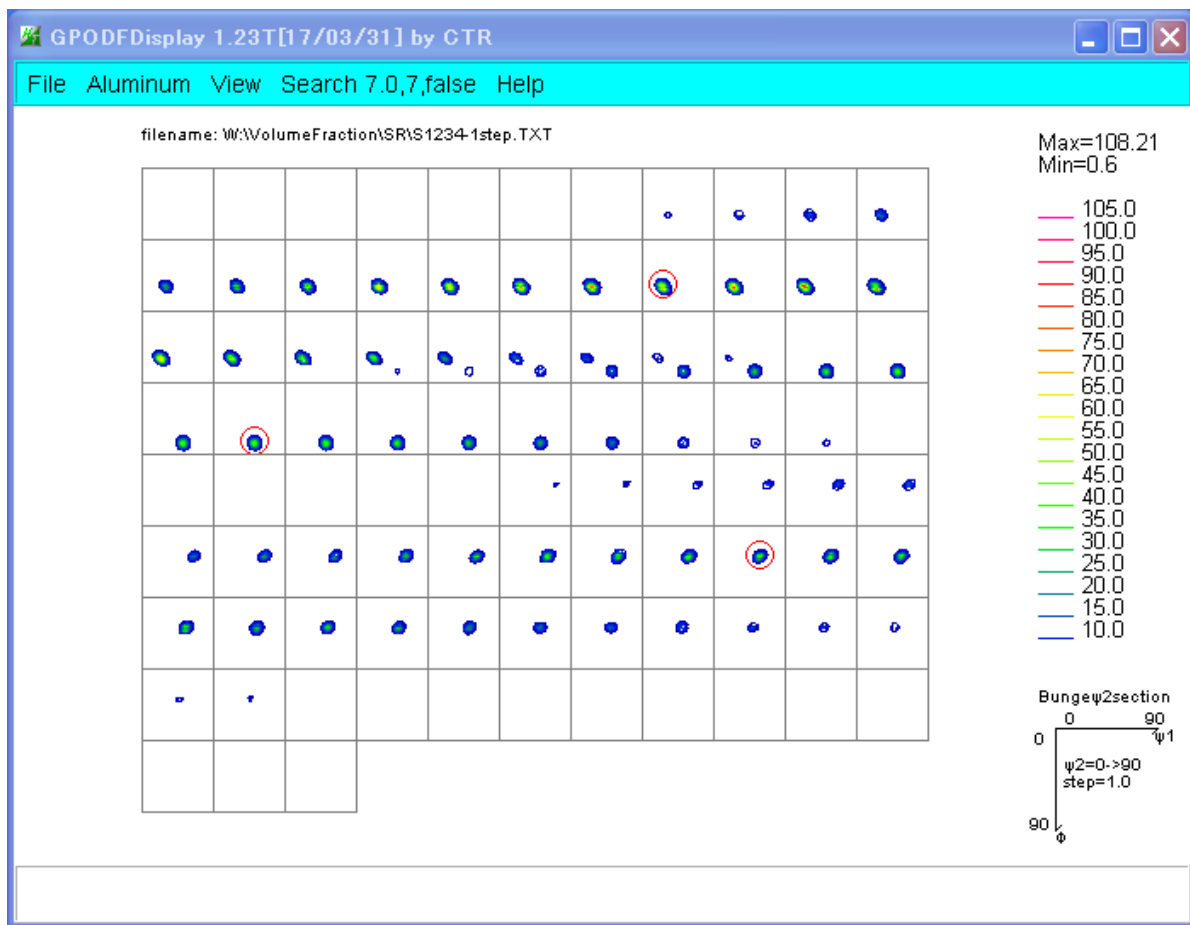
f1	F	f2	ODF	calcf1	calcF	calcf2	hkluvw	EqualDirection
26.59	59.72	19.87	33.0	26.98	64.12	14.04	(1 4 2)[2 -1 1]	1
53.73	39.63	68.56	38.6	66.05	43.12	68.2	(20 8 23)[-3 -4 4]	1
53.06	74.63	33.97	33.0	52.87	74.5	33.69	(2 3 1)[3 -4 6] S	2

2. 5 度間隔



f1	F	f2	ODF	calcf1	calcF	calcf2	hkluvw	EqualDirection
27.42	58.2	17.03	52.8	25.77	57.69	18.43	(1 3 2)[17 -11 8]	1
52.84	74.53	33.68	53.1	56.79	77.4	26.57	(2 4 1)[1 -1 2]	1
59.28	37.84	61.8	53.1	43.71	38.33	71.57	(3 1 4)[-2 -6 3]	1

S 方位 (1 度間隔)



f1	F	f2	ODF	calcf1	calcF	calcf2	hkluw	EqualDirection
27.14	56.92	18.11	108.2	27.03	57.69	18.43	(1 3 2)[6 -4 3] S	3

S 方位の様に、格子点からずれる場合、間隔が粗いと方位計算に無理があります。