

極点図解析、ODF 解析の LaboTex の魅力

http://www.geocities.jp/y_craturasuper/index.html

他の記事は上記サイトで確認してください。

Modeling 機能

Rp% の算出 (各処理段階で Rp% を計算しデータの妥当性が評価出来ます)

結晶方位の Database 化

各種処理結果がファイル化されていて自由に解析が出来る

外部処理結果の取り込み (平滑化を外部処理で可能)

本格的な VolumeFraction 計算

前回の資料では、ODF 図の平滑化に LaboTexODFFile を使用していましたが、

ODF データを直接平滑化すると $\phi 2$ に歪が発生する事が判明しました。

本資料では、ODF 解析した再極点図を Export し、LaboTexEPFtoPFtoODF3 ソフトウェアで再計算極点図の平滑化を行う手法で ODF の平滑化を行っています。

2017年02月08日

2017年02月11日修正

HelperTex Office

概要

LaboTexの説明時、最初に説明する機能は、Modeling機能です。通常、極点図を入力して、ODF解析を行い、ODF図から結晶方位を求めますが、この逆の機能から説明します。このModeling機能は他のODFソフトウェアには存在しません。この機能で、cube、copper、S方位の方位密度の関係を理解して頂きます。

結晶方位は $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ として Euler 空間 (ϕ_1 、 Φ 、 ϕ_2) の密度の高い箇所を探し決定しますが、結晶方位は整数で表現されていますが、(ϕ_1 、 Φ 、 ϕ_2) は実数で一致しません。このような時、(ϕ_1 、 Φ 、 ϕ_2) も Database 登録が可能で、VolumeFraction 候補として扱うことが出来ます。

極点図の変化に忠実に従った解析方法 (ADC法) が採用されている為、扱う結晶粒の数が少ない場合 ODF 図が凸凹する欠点もありますが、サポートするソフトウェアで改善されます。

入力極点図の Error や、VolumeFraction 結果の Error を評価することでブラックボックスでない、信頼できる解析結果を得ることが可能になっています。

極点図や ODF 図では手法の判断が出来ません。VolumeFraction 計算で大小の判断が出来ます。

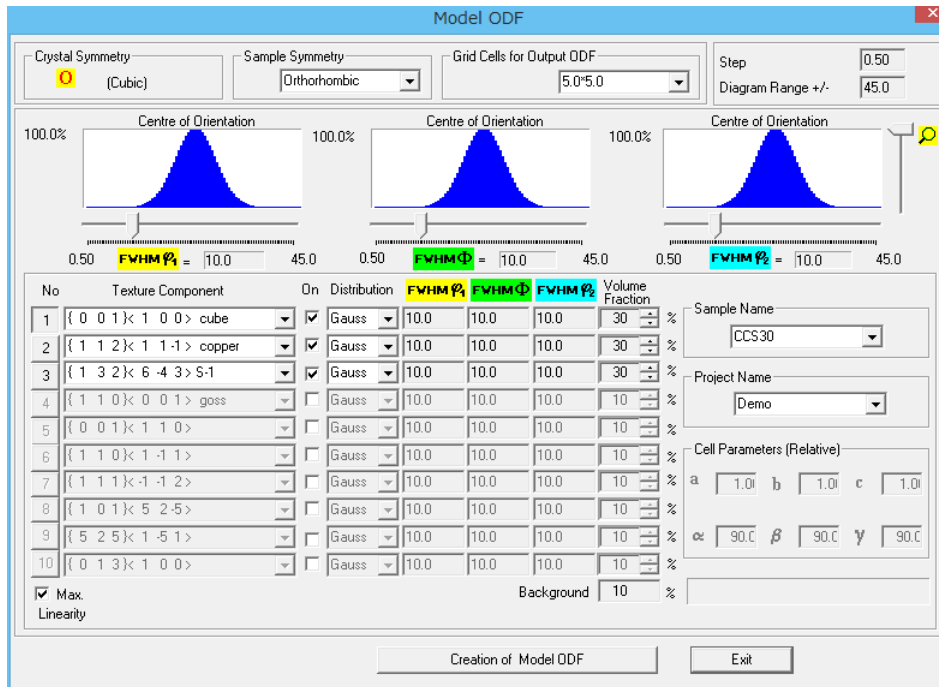
Table I. Standard Texture of Spherical Components with Gaussian Distribution ($b = 12.5$ Deg) and Its Multiplicity (Cubic/Orthorhombic) in the $90 \times 90 \times 90$ Deg Region

Miller Index $\{hkl\} \langle uvw \rangle$	Euler Angles		ODF (Maximum at Exact Position)	Multiplicity (m)
	$\{\phi_1, \Phi, \phi_2\}$	$\{\alpha, \beta, \gamma\}$		
Bs, $\{110\} \langle 112 \rangle$	{35.26 deg, 45 deg, 0 deg}	{54.74 deg, 45 deg, 0 deg}	130.95	2
Copper, $\{112\} \langle 111 \rangle$	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2
S $\{123\} \langle 634 \rangle$	{58.98 deg, 36.7 deg, 63.44 deg}	{31.02 deg, 36.7 deg, 26.57 deg}	56.89	1
Goss, $\{110\} \langle 001 \rangle$	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
Cube, $\{001\} \langle 100 \rangle$	$\{\phi_1 + \phi_2 = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\Phi = 0$ deg}	$\{\alpha + \gamma = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated cube, $\{001\} \langle 110 \rangle$	$\{\phi_1 + \phi_2 = 45$ deg, 135 deg, $\Phi = 0$ deg}	$\{\alpha + \gamma = 45$ deg, 135 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated Goss, $\{110\} \langle 011 \rangle$	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
$\{111\} \langle 112 \rangle$	{90 deg, 54.75 deg, 45 deg}	{0 deg, 54.74 deg, 45 deg}	130.95	2
$\{112\} \langle 110 \rangle$	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2

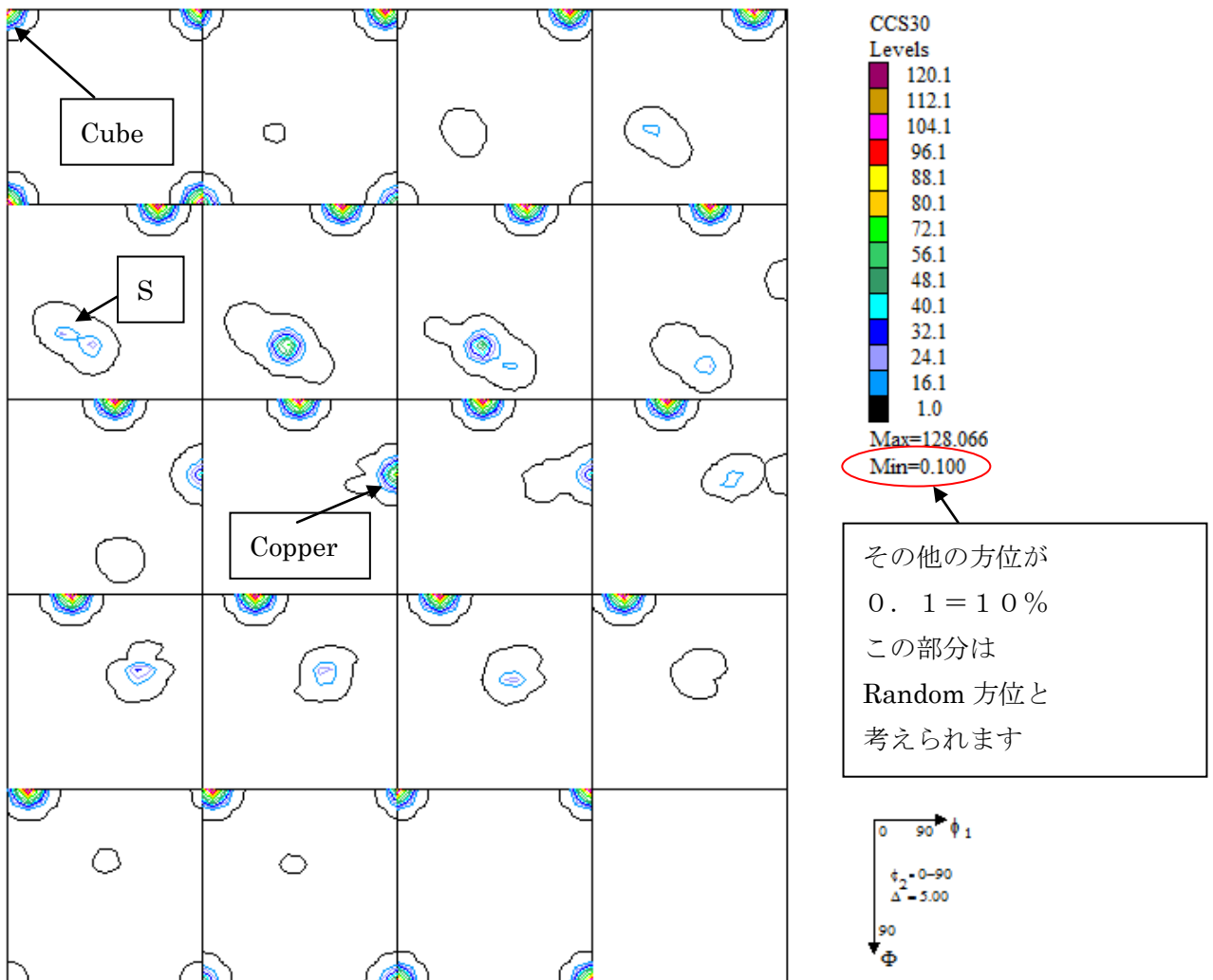
この関係を理解した上で、ODF 図や極密度 ODF 図の方位密度の大小関係を評価してください。

ODF図の最大方位密度方位が主方位とは限りません

cube、copper、S方位の VolumeFraction が30%含まれる ODF 図を Modeling



cube 30%, copper 30%、S 30%含むODF図

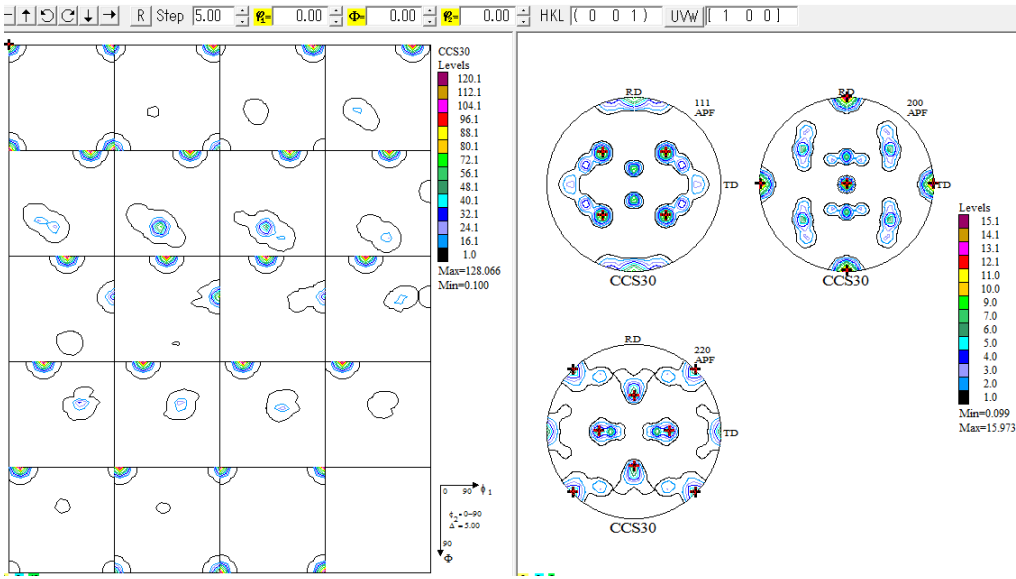


方位密度として、cube:128 copper: 79.7 S:16 が読み取れます。

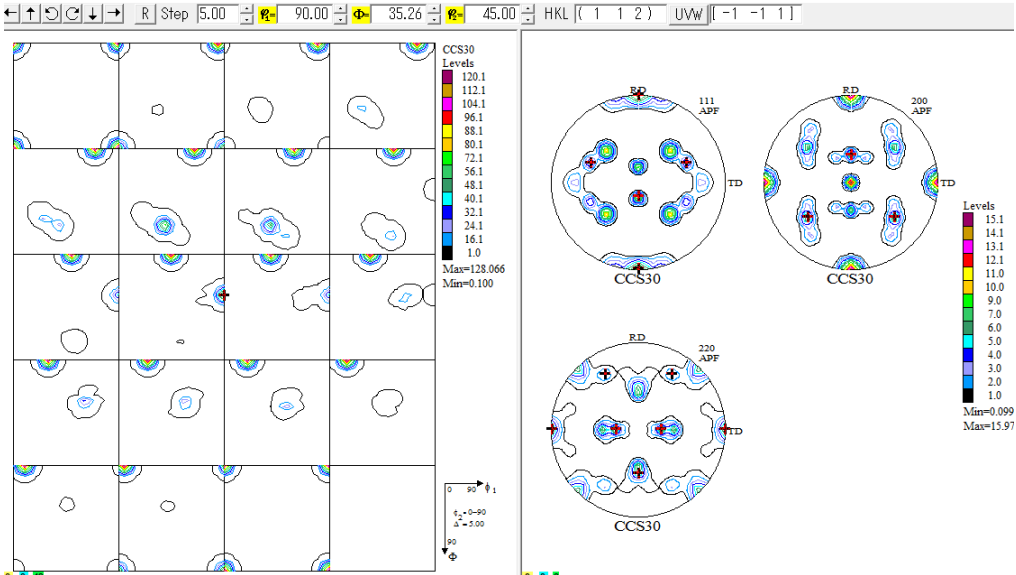
結晶方位の定量値が同一でも、最大密度は一致しない事が簡単に計算出来ます。

cube, copper, S方位のODF図と極点図

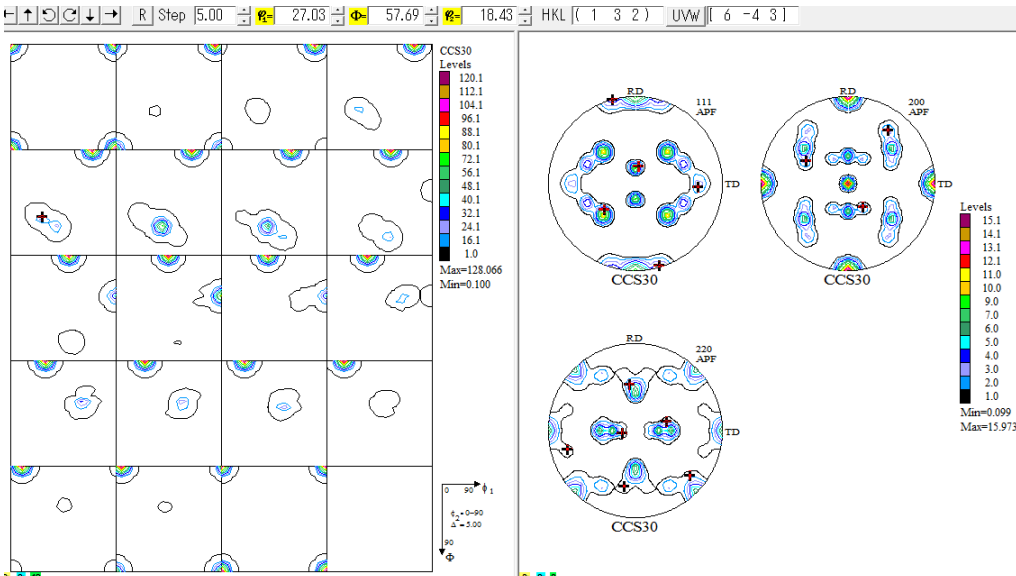
cube方位



copper方位



S方位

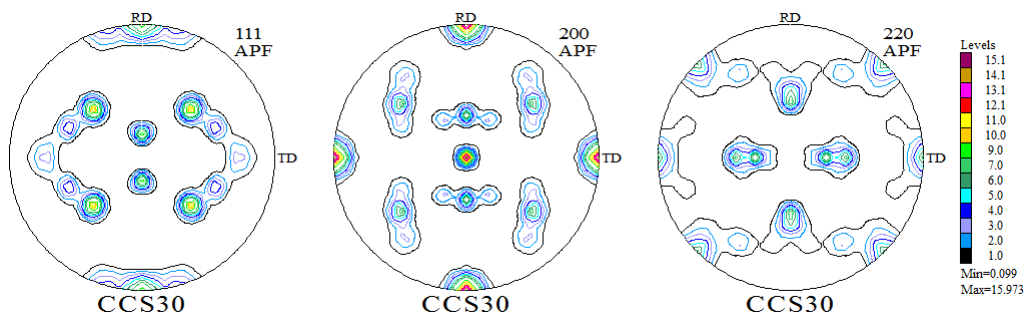


極点図の極密度も同一で VolumeFraction と一致しない

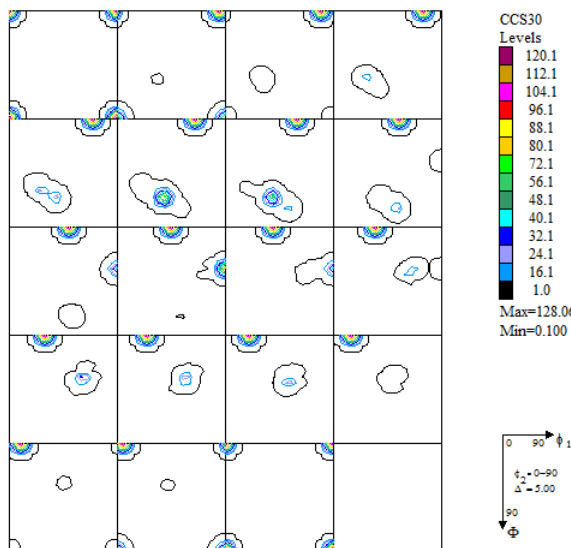
ODF図上、極点図上をマウスクリックすると、結晶方位{hkl}<uvw>を表示します

測定データからODF解析し,VolumeFractionを求める(前記述の逆のながれ)

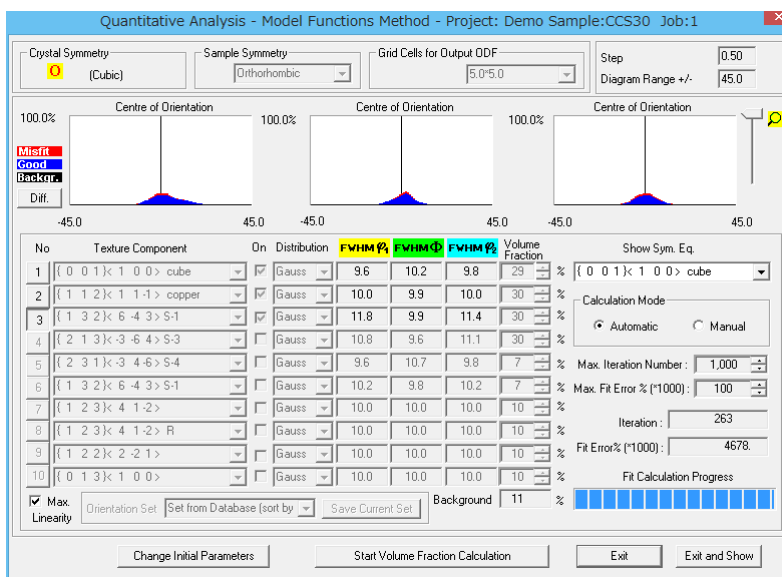
以下のデータを入力極点図とし、ODF解析を行い、ODFからVolumeFractionを計算します。



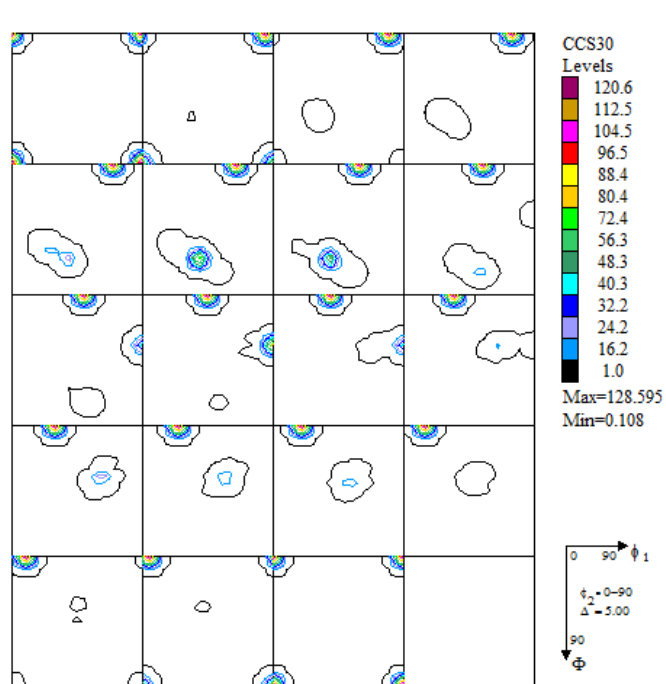
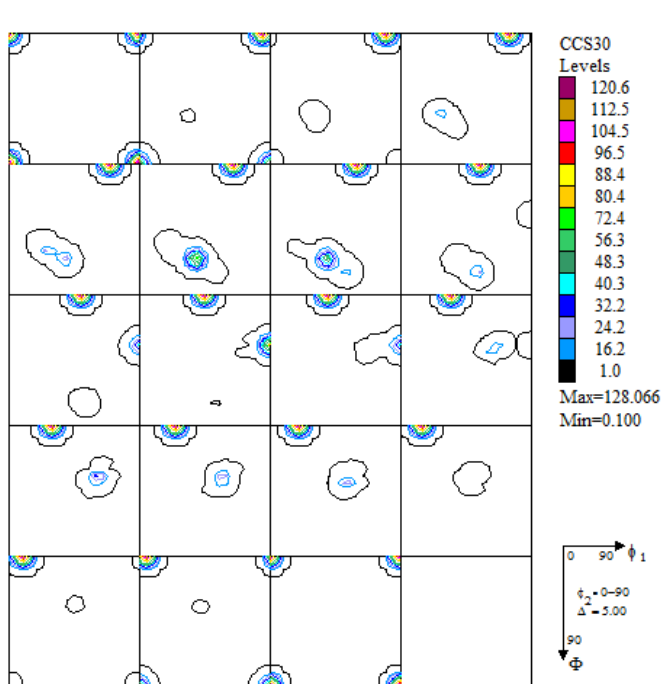
ODF解析結果



ODF解析結果からVolumeFractionを求める



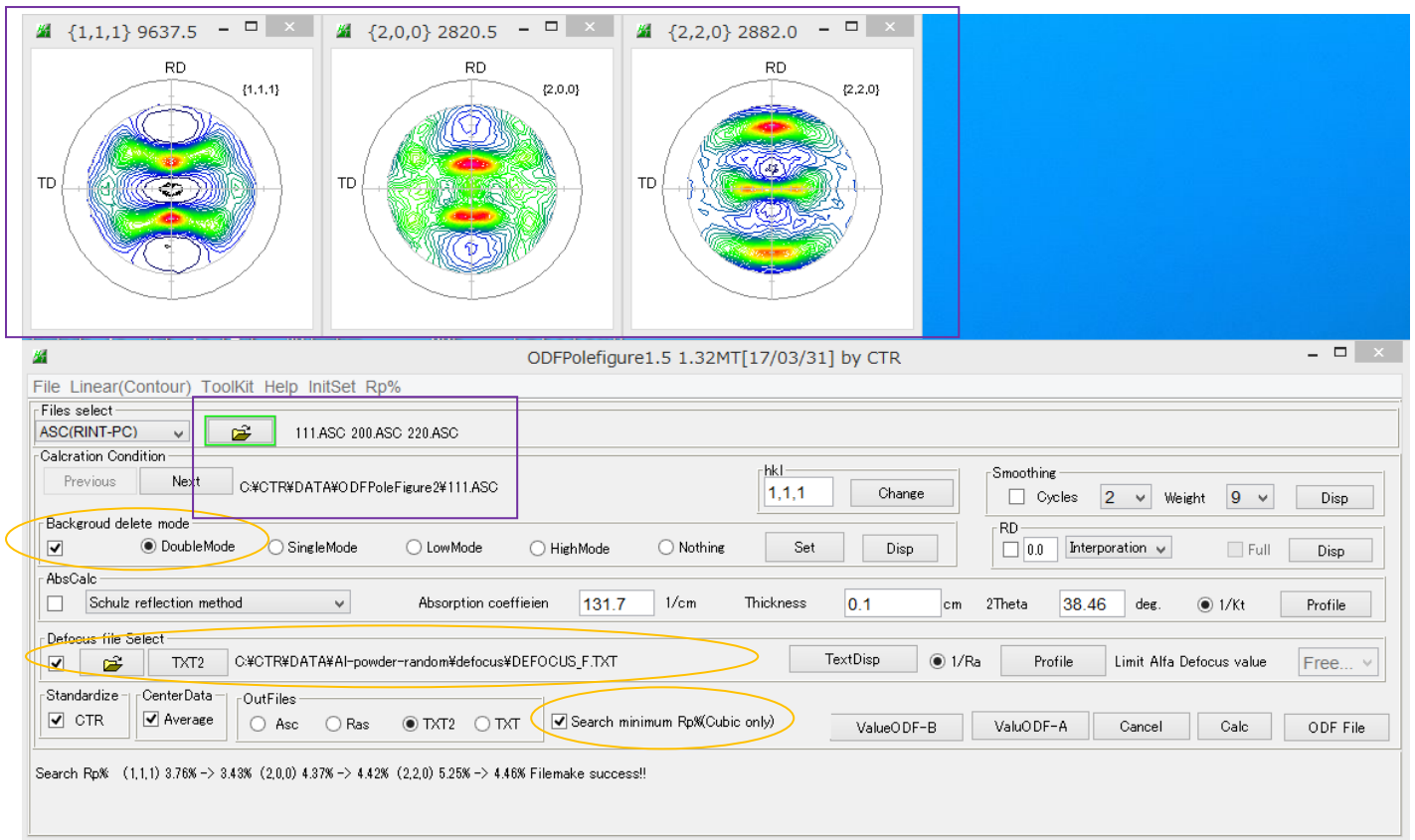
入力極点図から解析したODF図(左)とVolumeFractionから計算したODF図(右)の比較



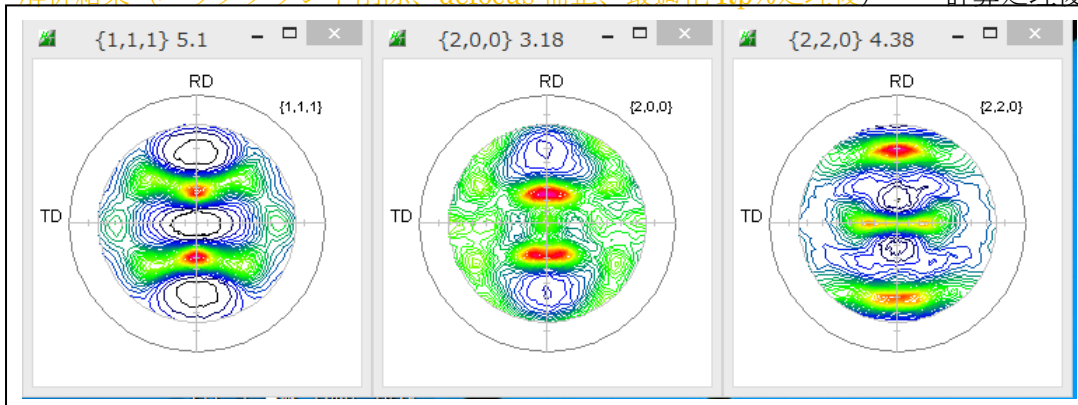
同一の結果と解析されます。

正確にErrorを求めるには、双方から再計算極点図を求め、Rp%を計算する。

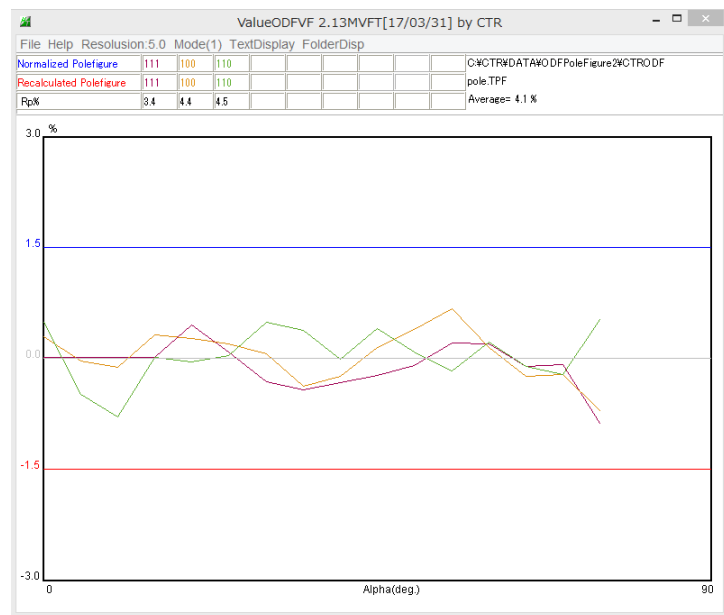
実際の測定データ解析 入力データ



解析結果 (バックグラウンド削除、defocus 補正、最適化 Rp%処理後) 計算処理後データ



Error 評価 (入力極点図と予測される ODF 解析後の極点図から Rp%を計算)



$$Rp_{\{hkl\}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left| \frac{\{PF_{exp.}\}_j - \{PF_{calc.}\}_j}{\{PF_{exp.}\}_j} \right| \cdot 100\%$$

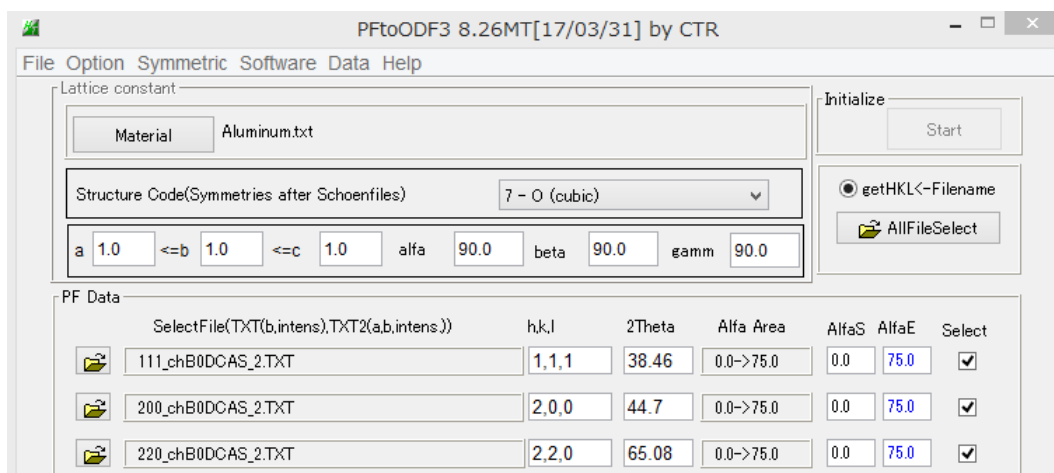
Alfa の 0 度は極点図の中心

Error プロファイルが
±1.5%以内で正常

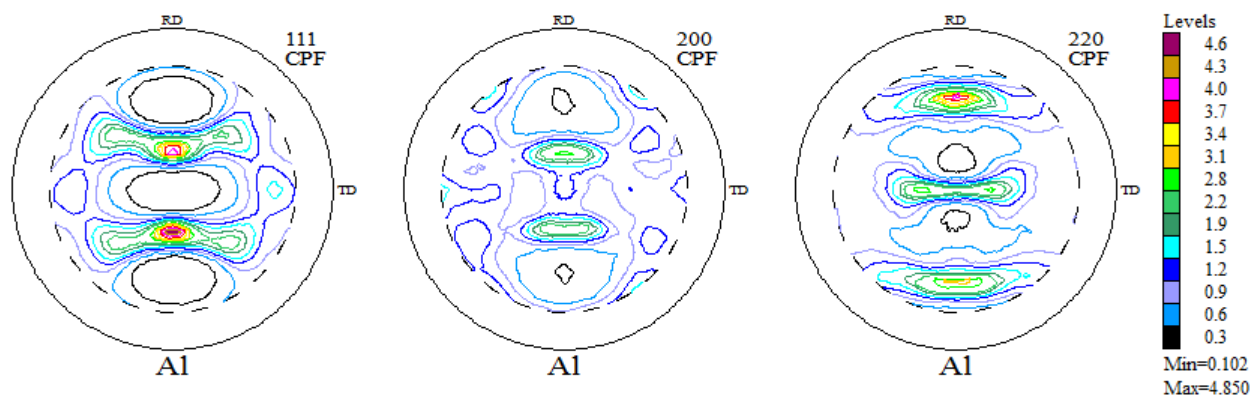
Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	3.4	4.4	4.5

C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\CTRODF
pole.TPF
Average= 4.1 %

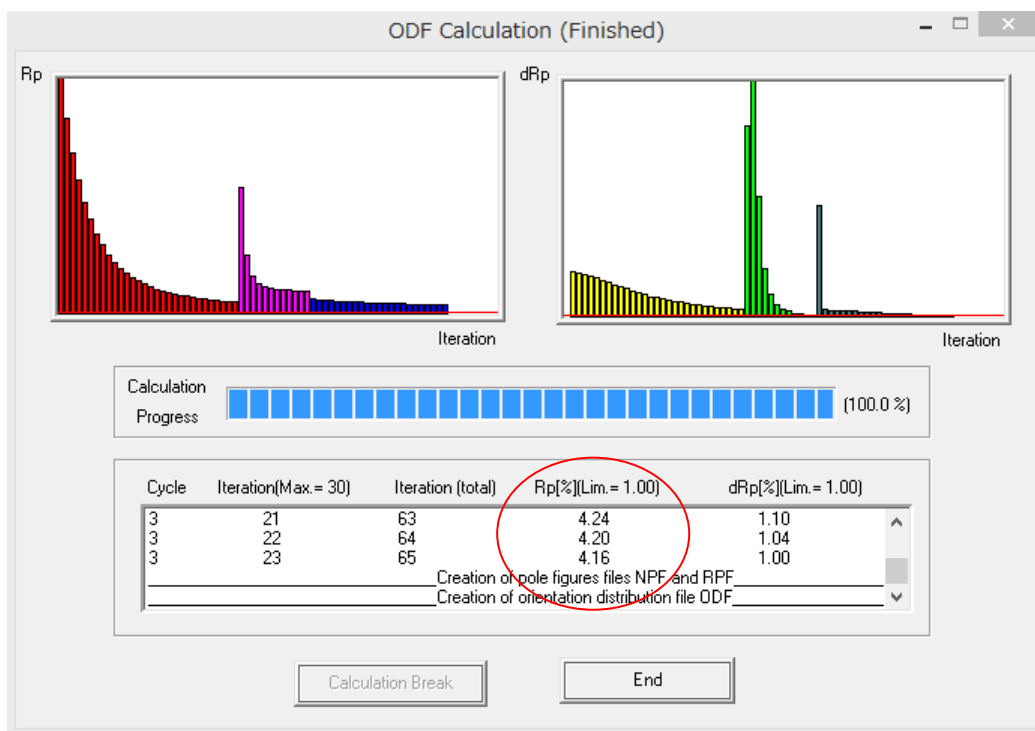
極点処理結果から L a b o T e x 向けファイルを作成



L a b o T e x で読み込む

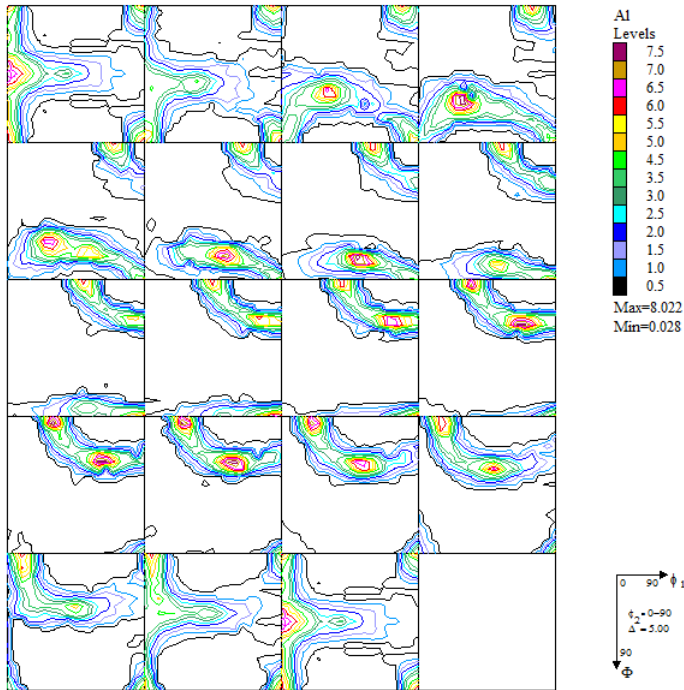


1 / 4 対称で ODF 解析

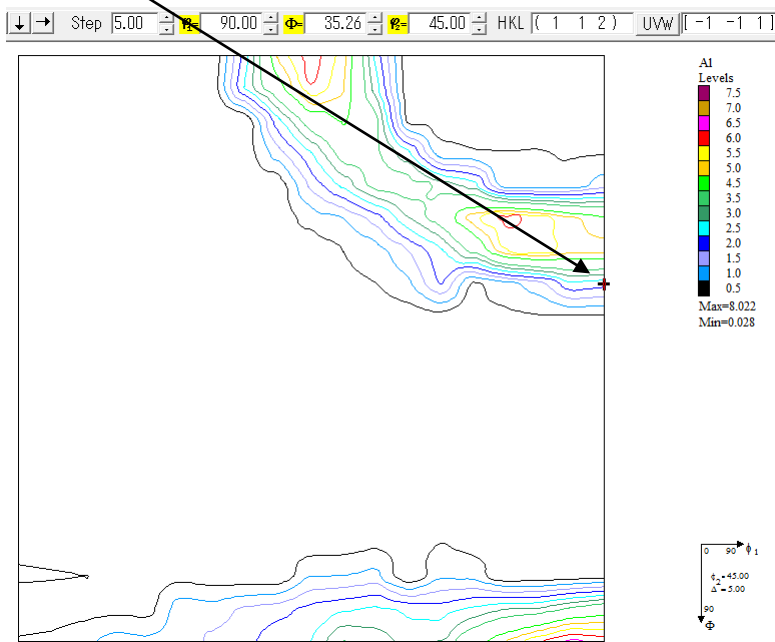


データ処理で予測した値に近い R p % が算出されています。

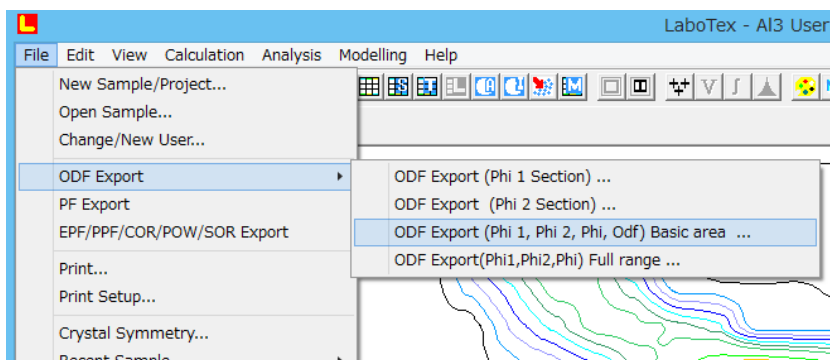
ODF 解析結果



Cubic-FCCのcubeと β -fiberの中間の様なODF図を示す。
copper方位からずれています。

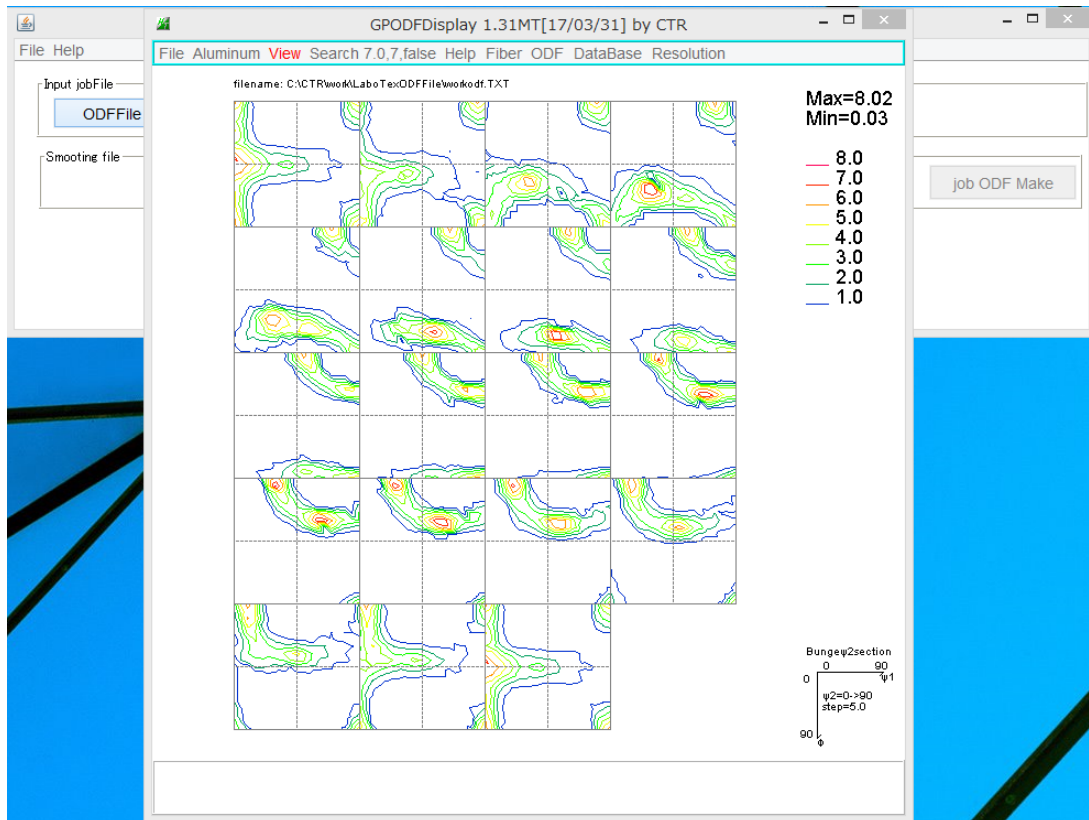


ODF図のピークサーチが必要です。

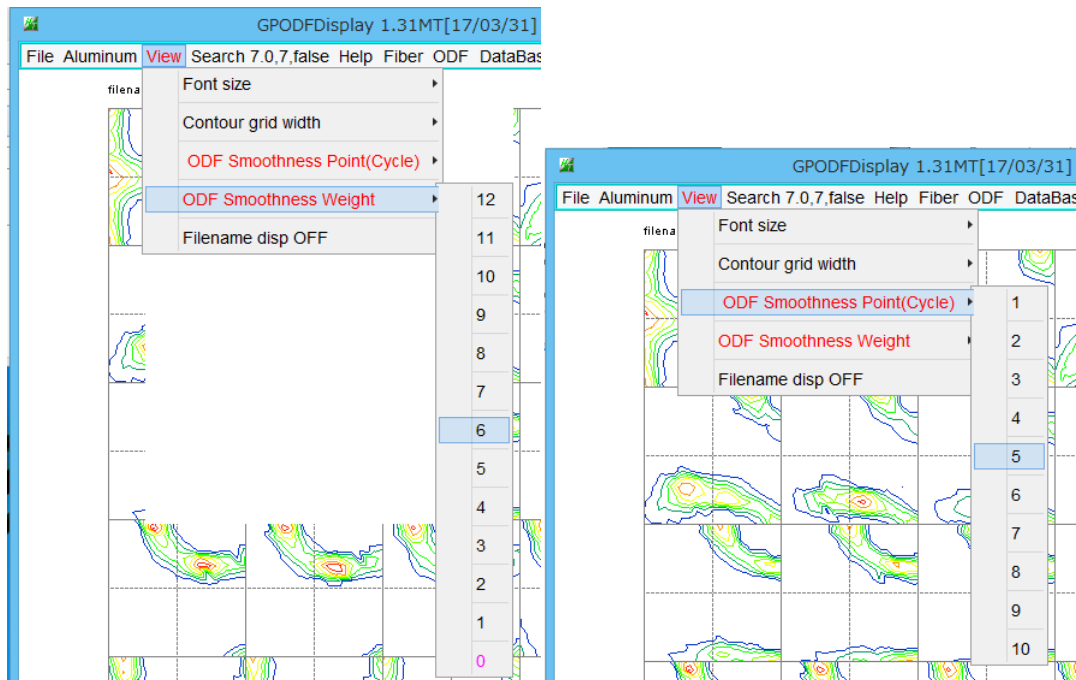


ODFデータをExportし、CTRソフトウェアでODF図の平滑化とピークサーチを行う

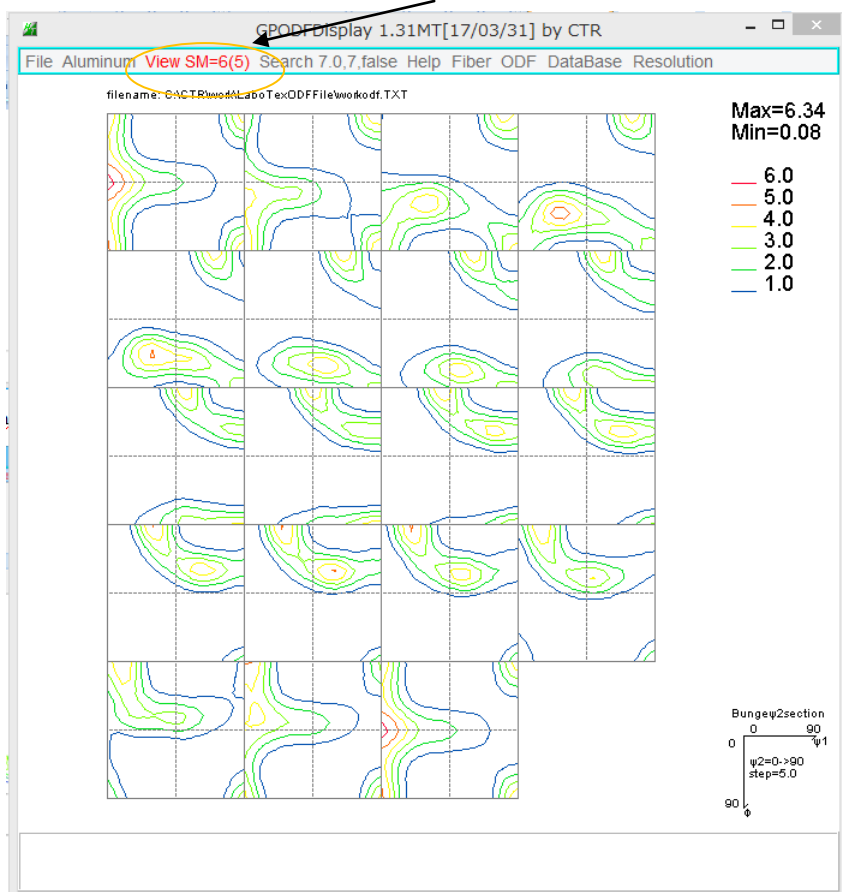
ODFPoleFigure1.5(2)->ODFAfterTools->GPODFDisplay ソフトウェアで処理
 処理するファイルを選択で ODF 図が表示される



平滑化を行う (Weight,Point(cycle)の組み合わせ)

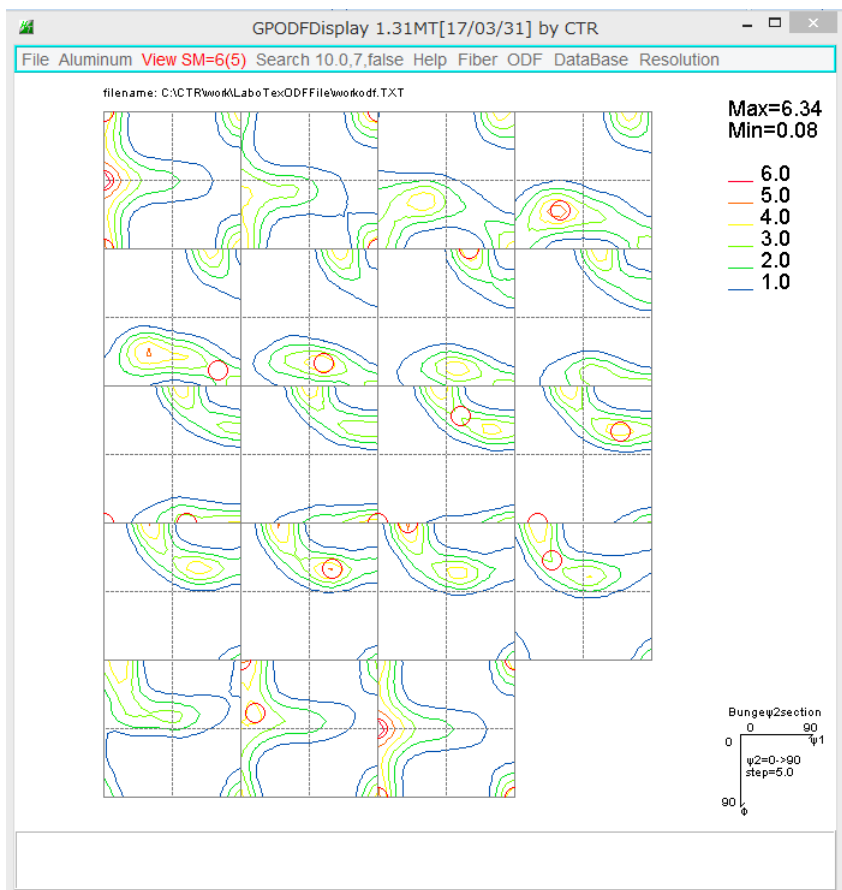


平滑化された ODF 図 (Weight=6,Point(cycle)=5)



ピークサーチを行う。

赤○印がピークサーチされています。



ピークリスト

f1	F	f2	ODF	calc1	calcF	calc2	hkluvw	EqualDirection
0.0	0.0	0.0	5.0	0.0	0.0	0.0	(0 0 1)[1 0 0]	cube 8
0.0	44.56	0.0	6.3	0.0	45.0	0.0	(0 1 1)[1 0 0]	goss 3
9.01	35.55	87.25	4.2	6.72	45.0	90.0	(1 0 1)[-1 -12 1]	1
23.46	24.03	74.93	3.0	47.13	33.85	74.74	(11 3 17)[-1 -2 1]	1
27.94	65.04	16.38	5.5	26.98	64.12	14.04	(1 4 2)[2 -1 1]	2
55.1	21.8	50.84	2.9	65.64	24.63	50.71	(11 9 31)[-9 -20 9]	1
53.08	75.11	25.58	4.9	56.98	76.85	25.71	(13 27 7)[1 -1 2]	1
55.21	90.0	38.27	3.3	54.57	90.0	38.66	(4 5 0)[5 -4 9]	1
69.66	28.93	55.42	4.6	63.07	27.25	56.31	(3 2 7)[-1 -2 1]	1
76.71	79.37	21.24	2.7	78.39	79.48	21.8	(2 5 1)[1 -2 8]	1
90.0	0.0	3.12	4.9	86.82	0.0	0.0	(0 0 1)[-1 -18 0]	1
90.0	90.0	3.63	5.1	90.0	90.0	3.58	(1 16 0)[0 0 1]	1

MAXODF= 6.34 MINIODF= 0.09

対称性を考慮すると

f1	F	f2	ODF	calc1	calcF	calc2	hkluvw	EqualDirection
0.0	0.0	0.0	5.0	0.0	0.0	0.0	(0 0 1)[1 0 0]	cube 8
0.0	44.56	0.0	6.3	0.0	45.0	0.0	(0 1 1)[1 0 0]	goss 3
27.94	65.04	16.38	5.5	26.98	64.12	14.04	(1 4 2)[2 -1 1]	2

MAXODF= 6.34 MINIODF= 0.09

に絞られます。

ODF 図の平滑化は、LaboTexTPFtoPFtoODF3 ソフトウェアで行います。

再計算極点図を E x p o r t し、LaboTexTPFtoPFtoODF3 で平滑化を行い

PFtoODF3 経由で読み込みます。

{111_0} 3.52

{200_1} 5.6

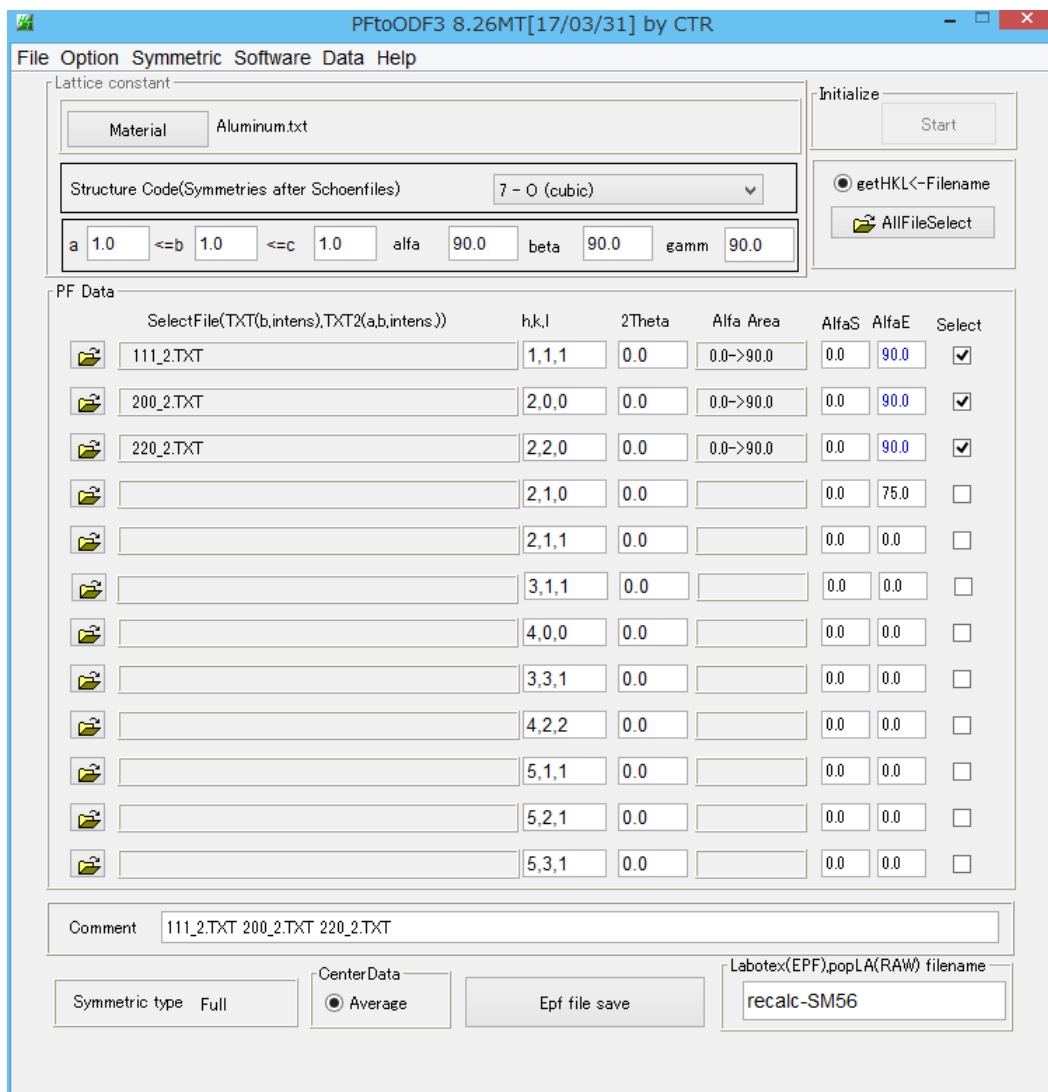
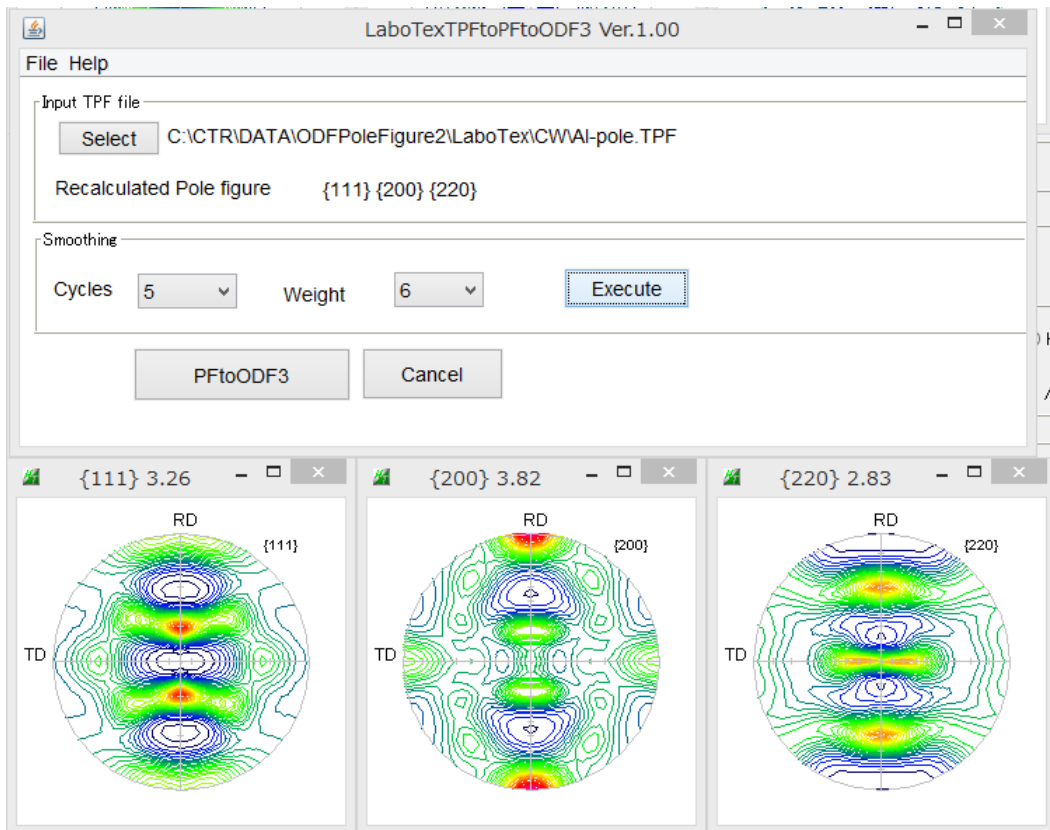
{220_2} 2.63

LaboTexTPFtoPFtoODF3 Ver.1.00

Input TPF file
 C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\LaboTex\CW\test111-recalc.TPF

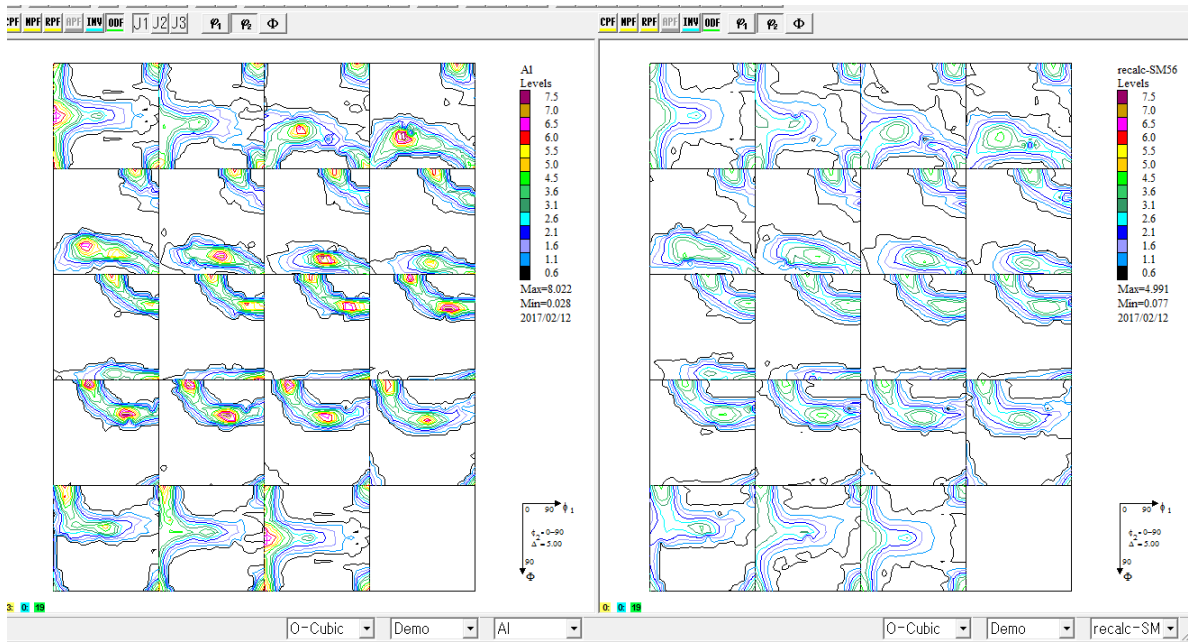
Recalculated Pole figure {111} {200} {220}

Smoothing
 Cycles Weight



PFTtoODF3ソフトウェアに平滑化したデータが渡されます。

LaboTex向けファイルを作成します。



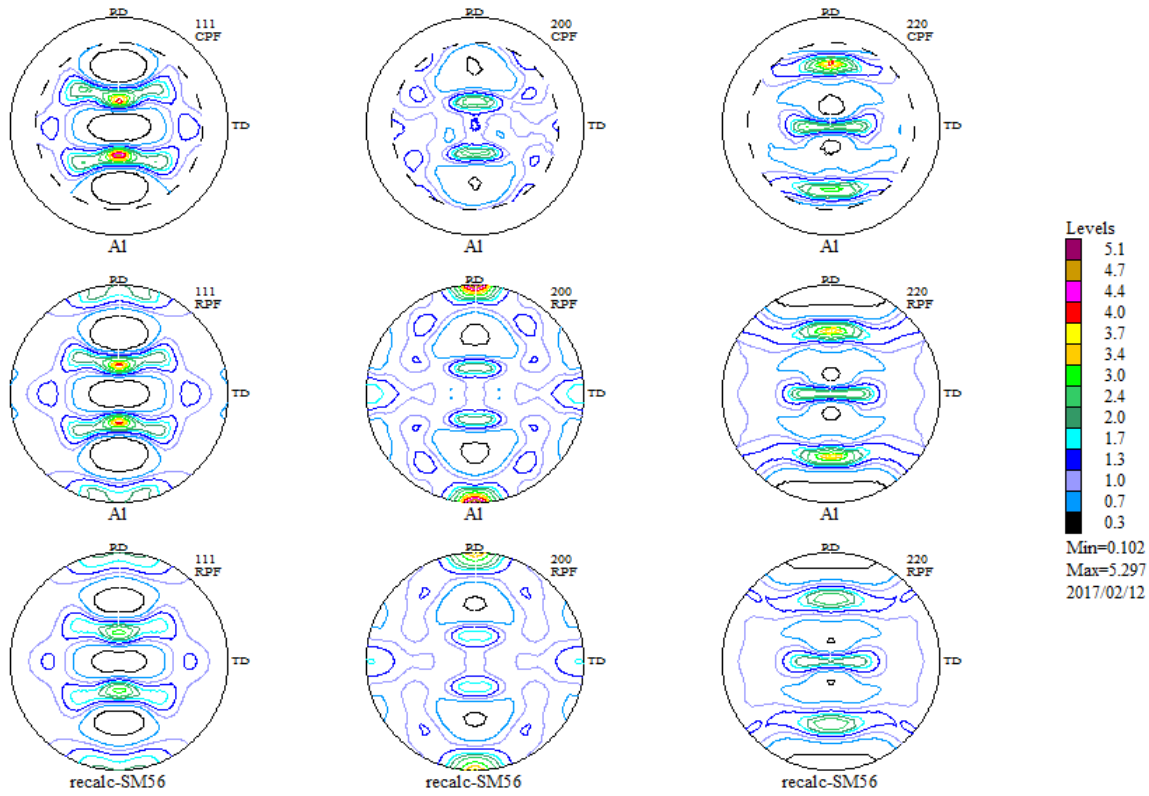
ピークサーチされた{142}<2-11>を DataBase に登録

{hkl}<uvw>ではなく(ϕ_1 、 Φ 、 ϕ_2)を登録の場合Newで登録します。

Job2 の R p % を調べる。

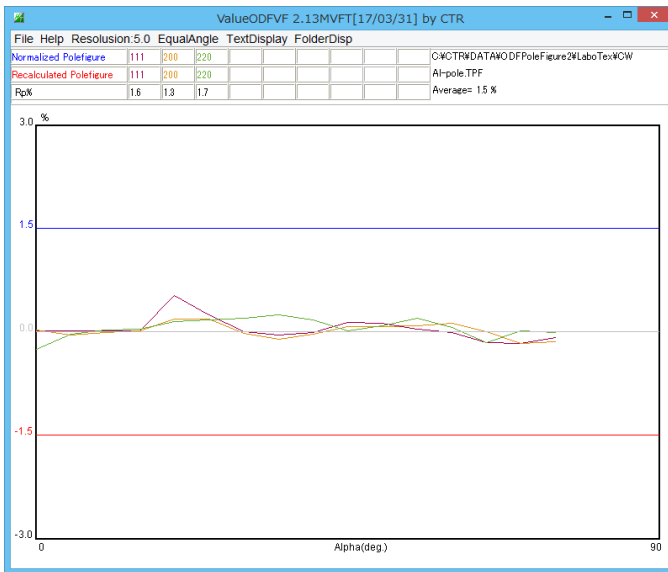
Job1 の極点図を Export し、Job2 で極点図を作成し Export する。

上段：入力極点図、中段:入力極点図から計算した極点図、下段：平滑化した ODF 図から計算した極点図



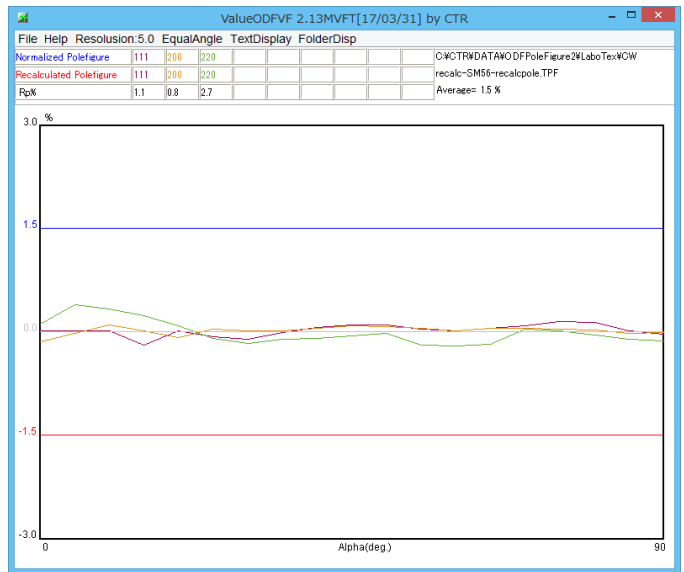
入力極点図と ODF 解析後の再計算極点図 Rp%

平滑化前と平滑化後の極点図 Rp%



Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	1.6	1.3	1.7

C:\CTR\DATA\ODF
AI-pole.TPF
Average= 1.5 %

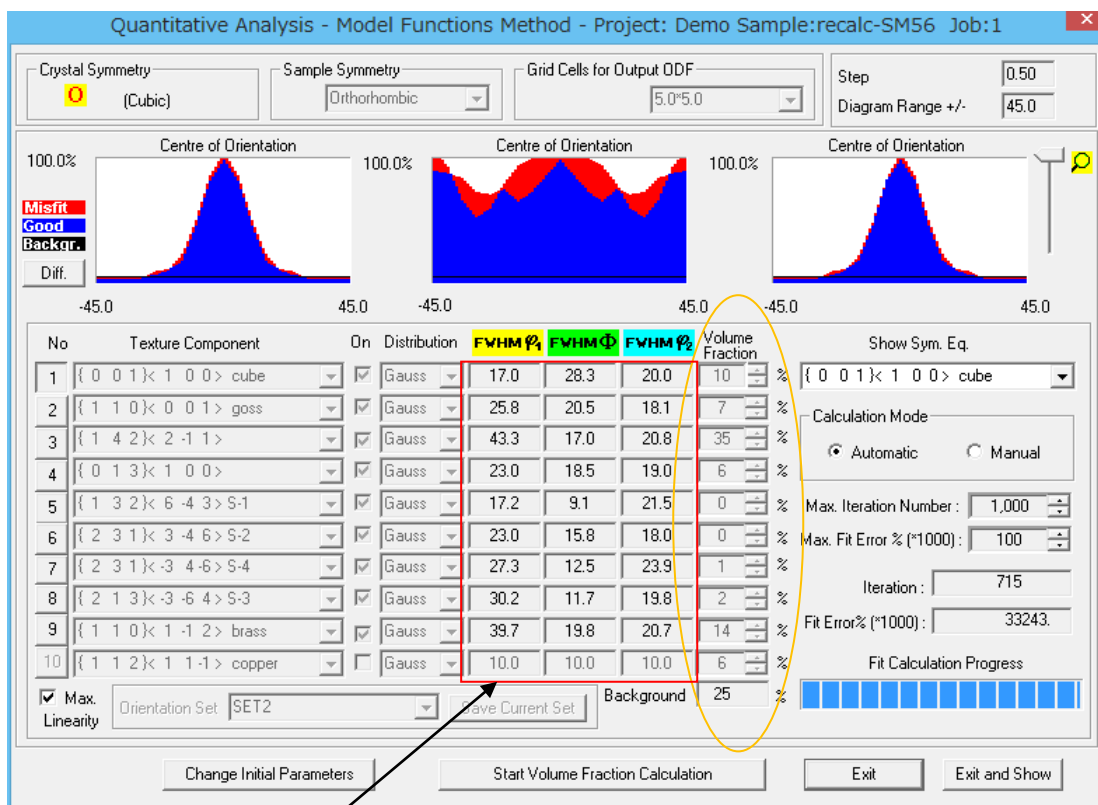


Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	1.1	0.8	2.7

C:\CTR\DATA\ODF PoleFigure2\LaboTex\CW
recalc-SM56-recalcpole.TPF
Average= 1.5 %

平滑化した ODF 図から VolumeFraction を求める

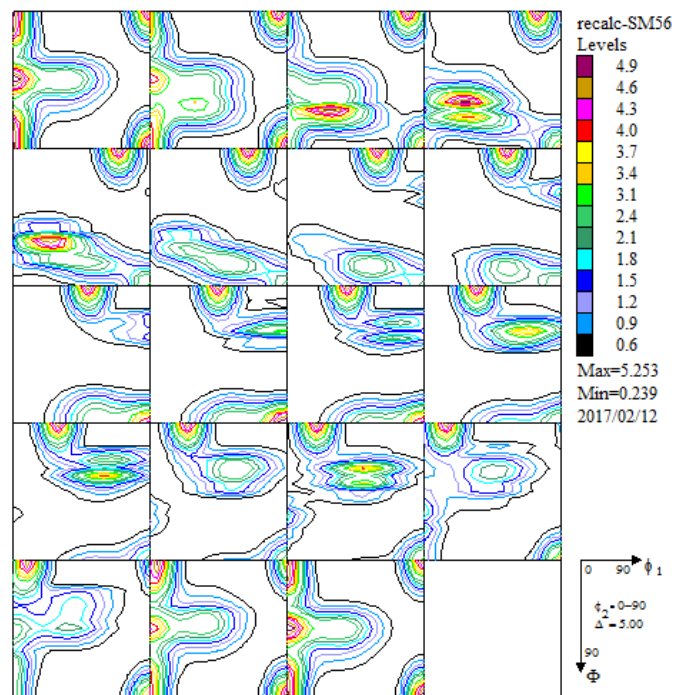
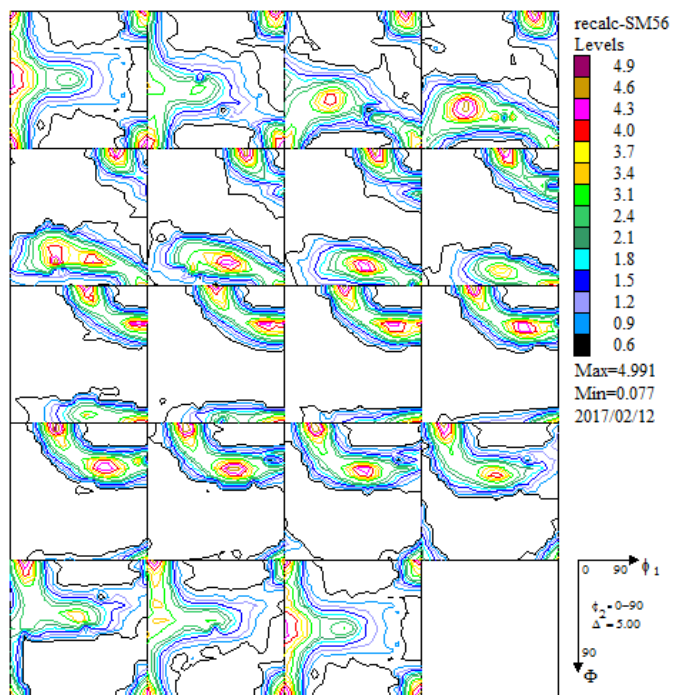
c o p p e r も含めて VolumeFraction を求める



Euler 空間に対し広がり为非対称で評価されています。

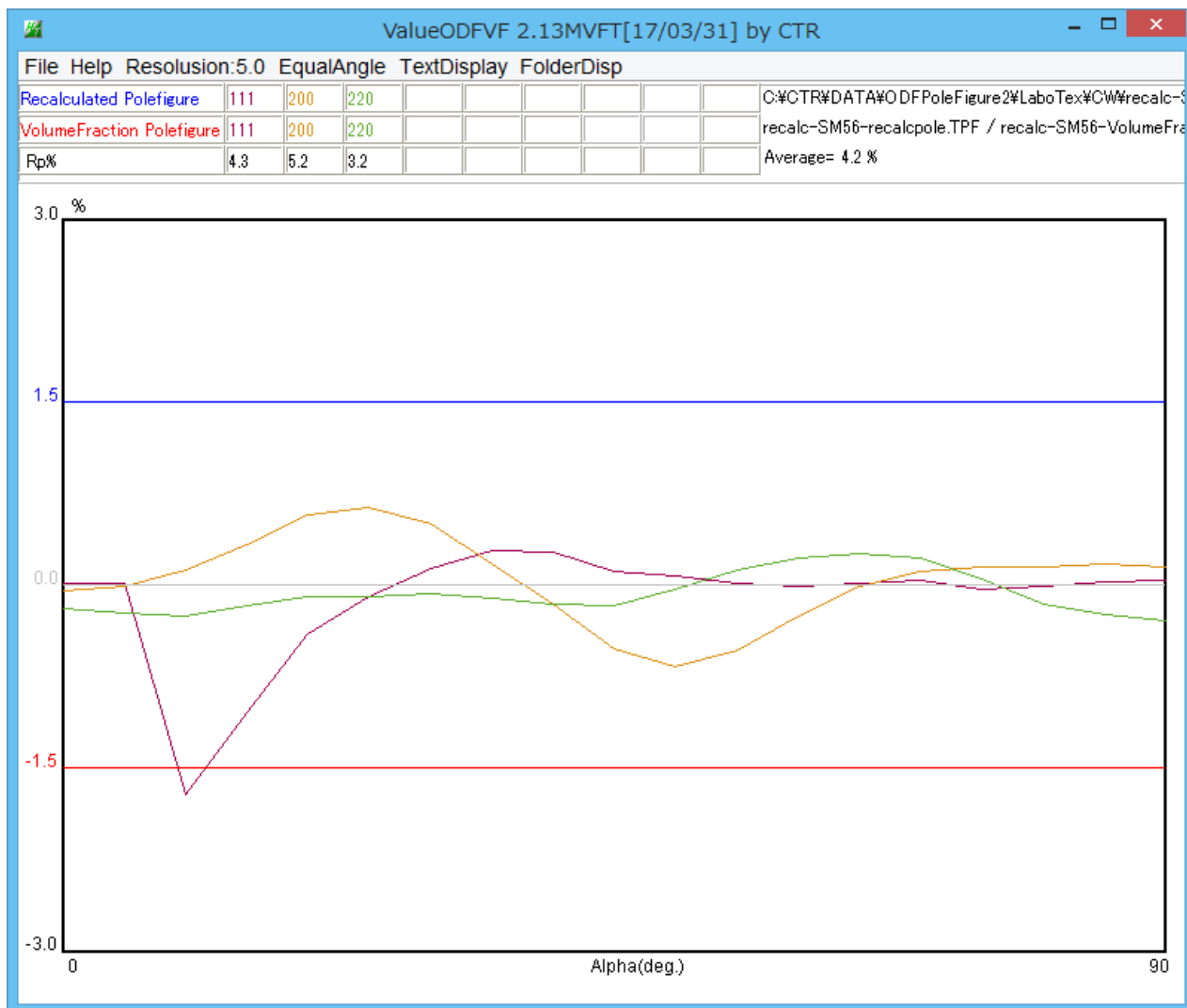
平滑化した ODF 図

VolumeFraction から計算した ODF 図



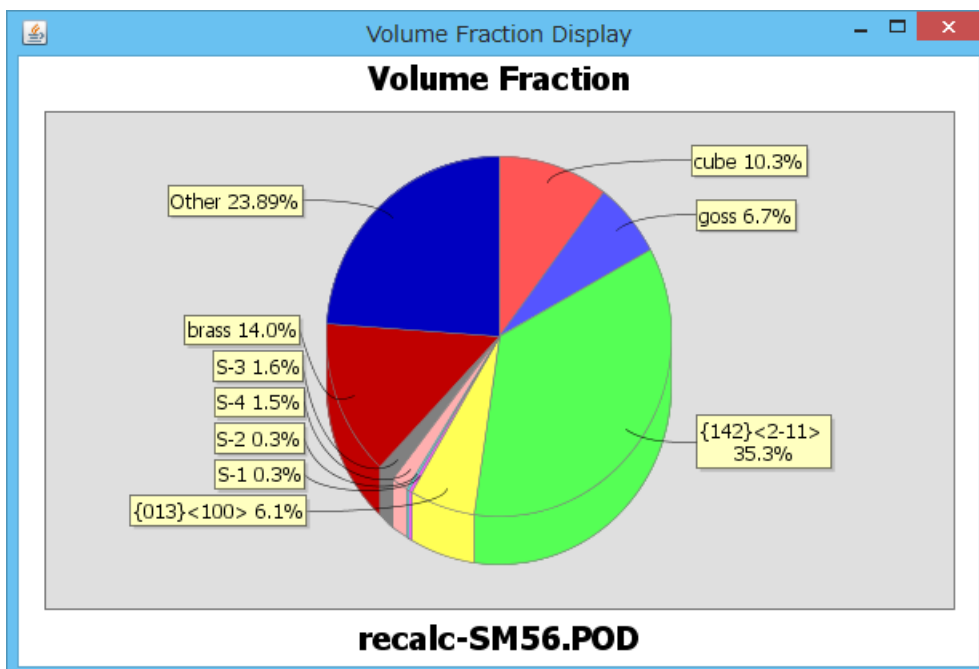
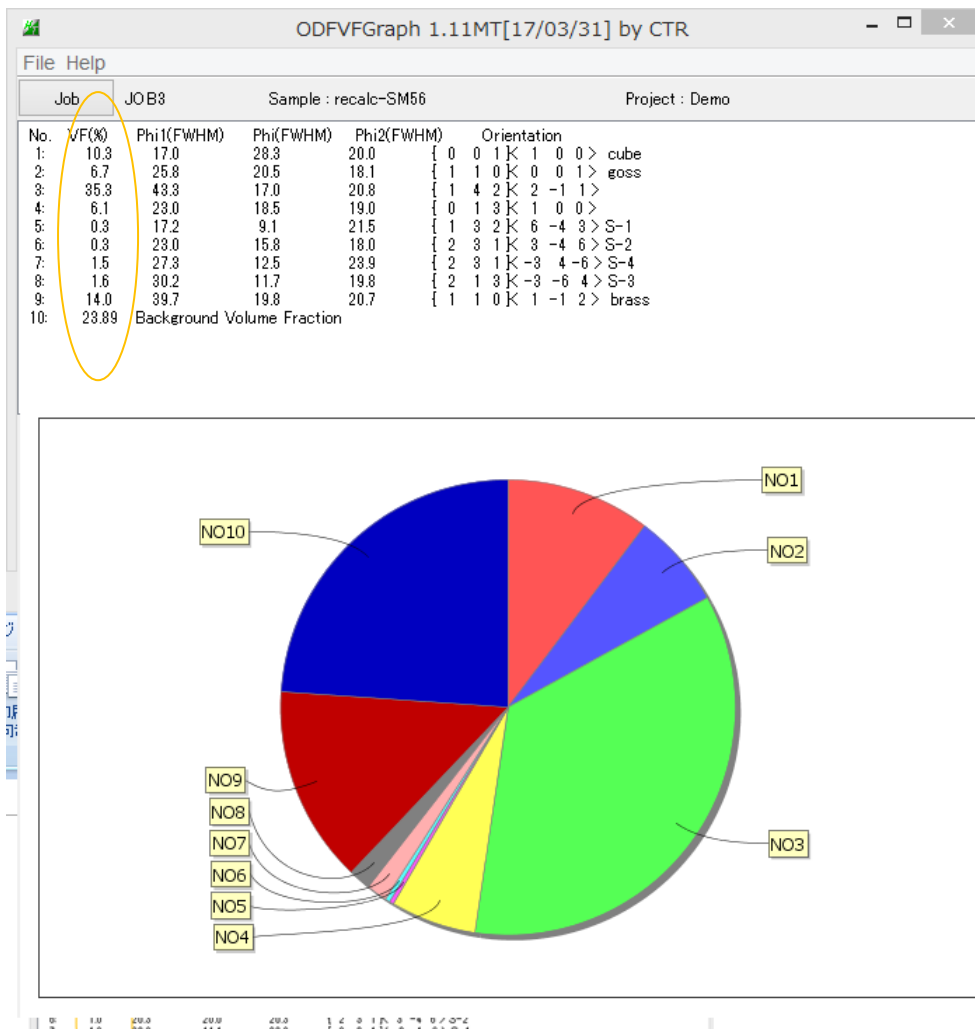
VolumeFraction から極点図{111},{200},{220}を作成し Export

平滑化した極点図と VolumeFraction の極点図 Rp%



Rp%プロファイルが±1.5%以下近くに計算されています。

VolumeFraction 結果のマトメ



Excelシート

Samplename	cube	goss	{142}<2-11>	{013}<100>	S-1	S-2	S-4	S-3	brass	Other
recalc-SM56.POD	10.3	6.7	35.3	6.1	0.3	0.3	1.5	1.6	14.0	23.89

S方位はS1 + S2 + S3 + S4から求めます