

既知の結晶方位をシュミレーションし完全極点図を作成

2016年10月18日



*HelperTex Office*

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

Measure-data¥完全極点図を作成

## 概要

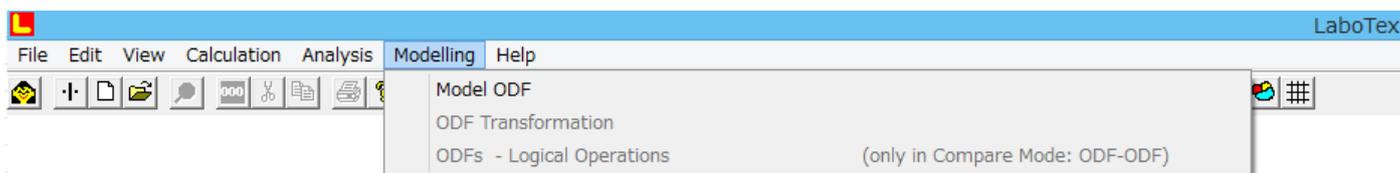
結晶方位  $\{h k l\} \langle u v w \rangle$  は、極点測定から ODF 解析を行い ODF 図が求め、ODF 図から結晶方位の定量を行うことができます。

逆に、複数の結晶方位から ODF 図を計算し、完全極点図を計算する事も出来ます。

以下に、LaboTex ソフトウェアによる方法を説明します。

## 複数の結晶方位を指定

LaboTex の Modelling->Model ODF 機能で作成



brass,copper,cube,goss 方位をそれぞれ 20%含まれる ODF 図を作成します。



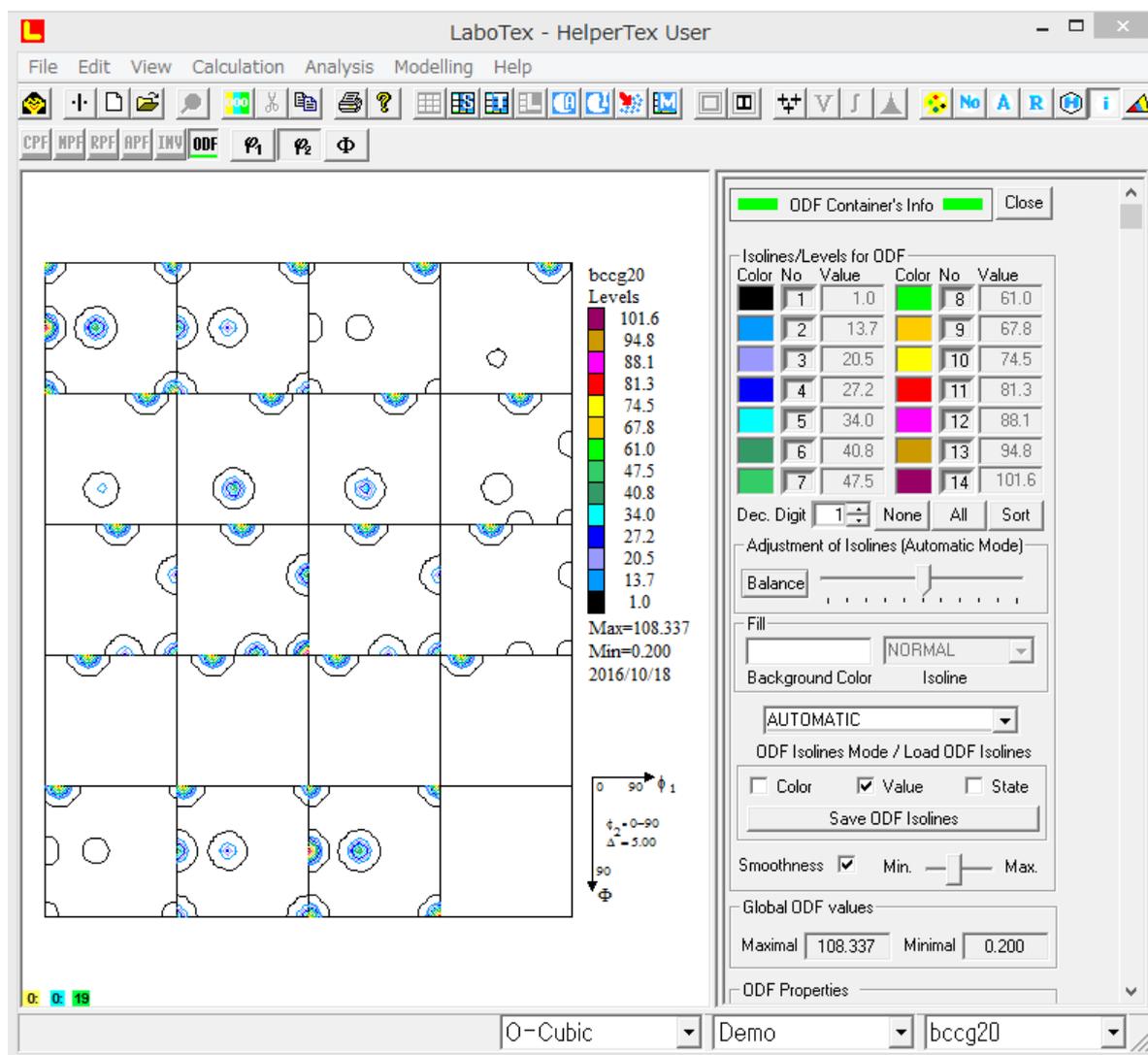
それぞれの結晶方位の Euler 空間上の広がり半幅を 10 deg としています。

この広がり半幅は、全て独立で指定することも可能です。



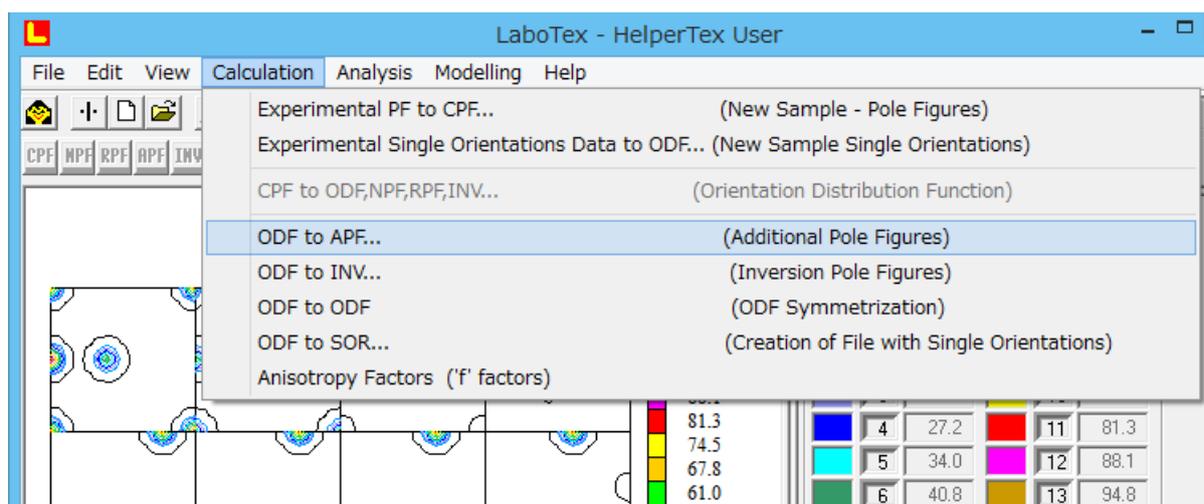
で ODF 図が作成出来ます。

作成される ODF 図

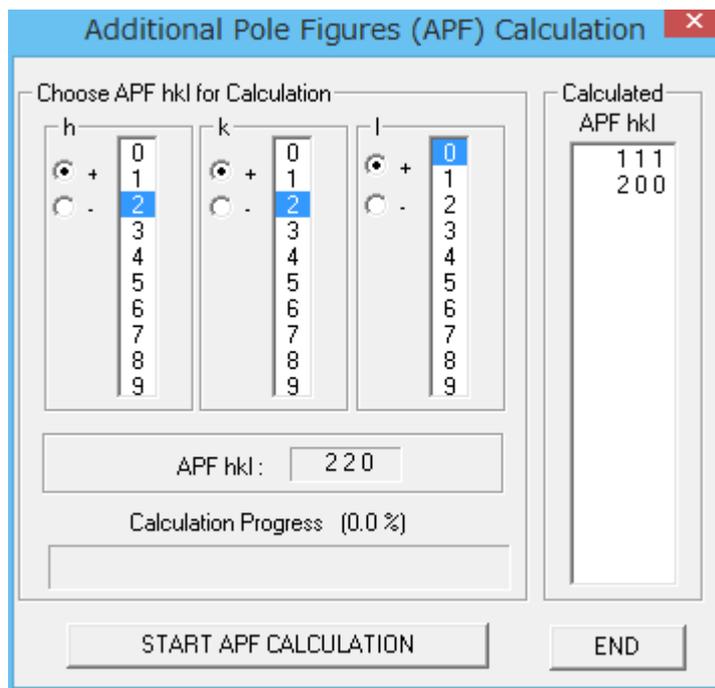


完全極点図の作成

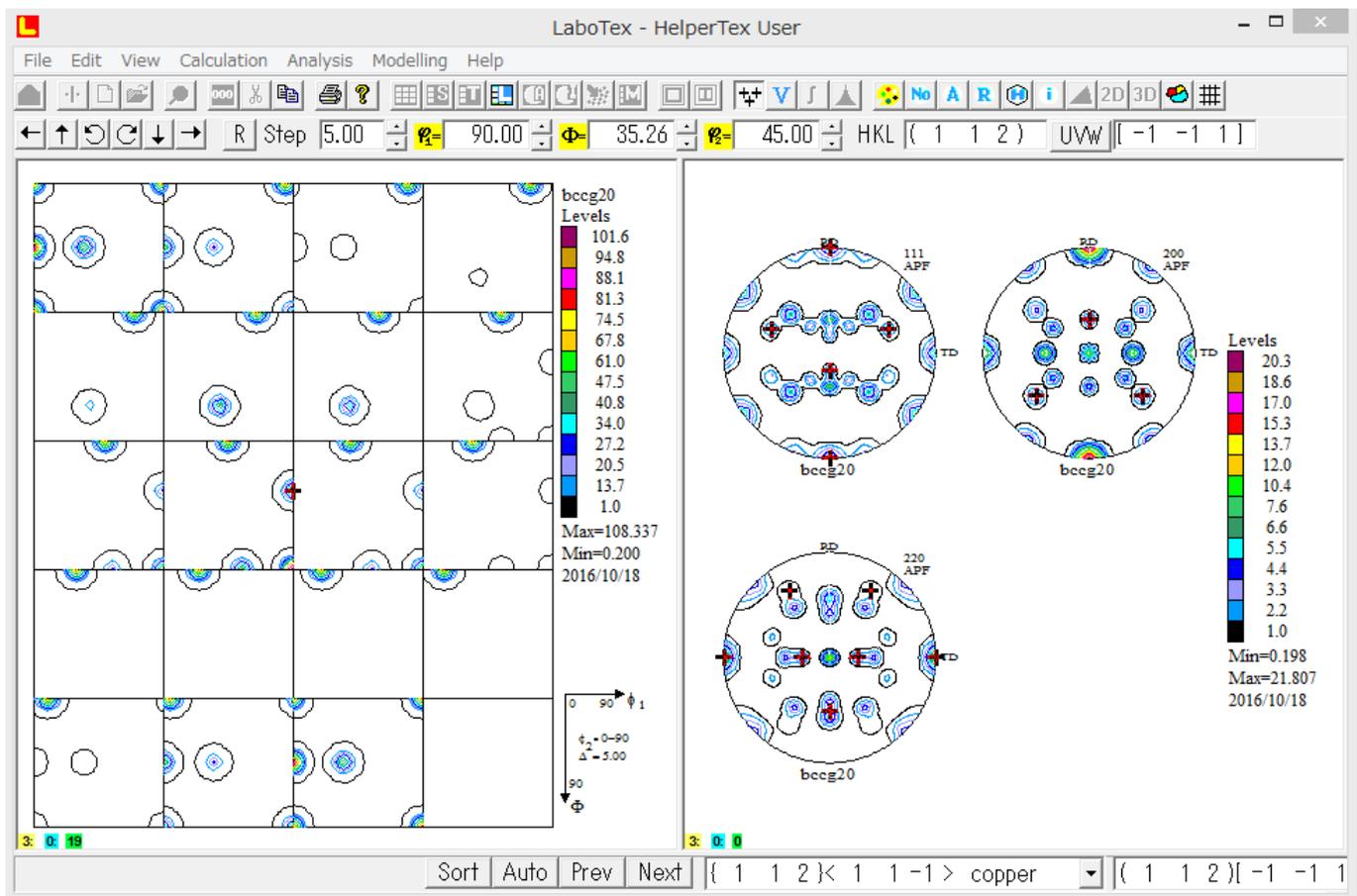
Calculation->ODF to APF で完全極点図を作成



複数の極点図を作成



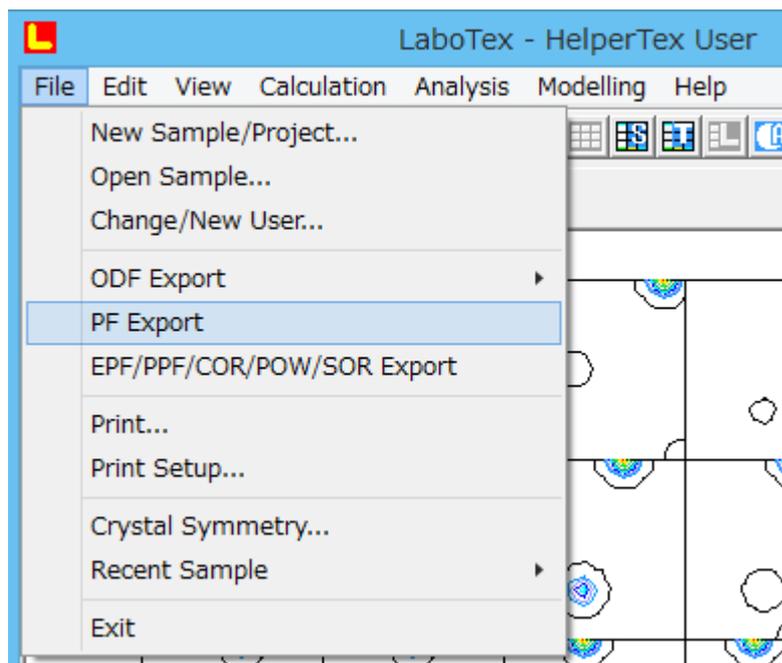
作成された ODF 図と極点図を同時に表示しています。



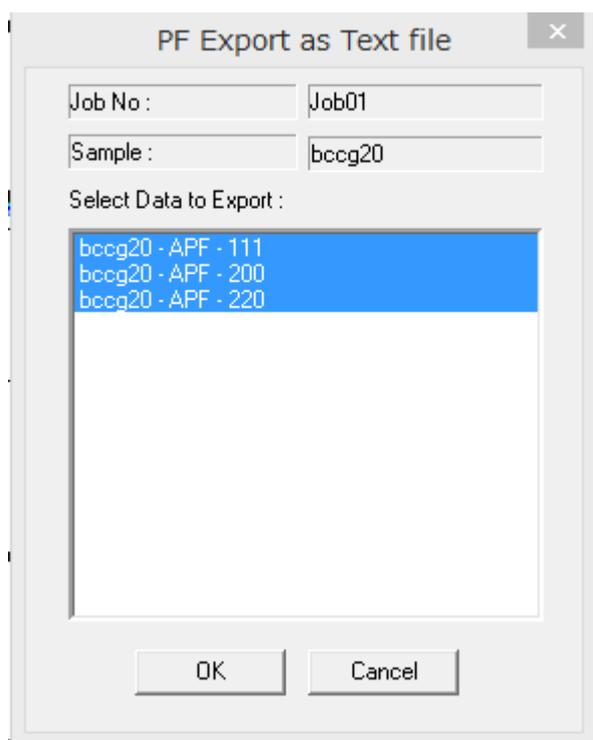
VolumeFracytion が同じでも Copper 方位は他の方位に比べ、方位密度が  $1/2$  である事が分かります。更に S 方位は  $1/4$  である事もシュミレーションされます。

## 極点図のExport

完全極点図をテキストデータやASCデータに変換するために Export



Export する極点図を選択



出力されるテキストデータ

複数の極点図が1つの TPF ファイルとして作成される

bccg20-pole.TPF

2016/10/18 2:59

TPF ファイル

8 KB

ADDITIONAL POLE FIGURE

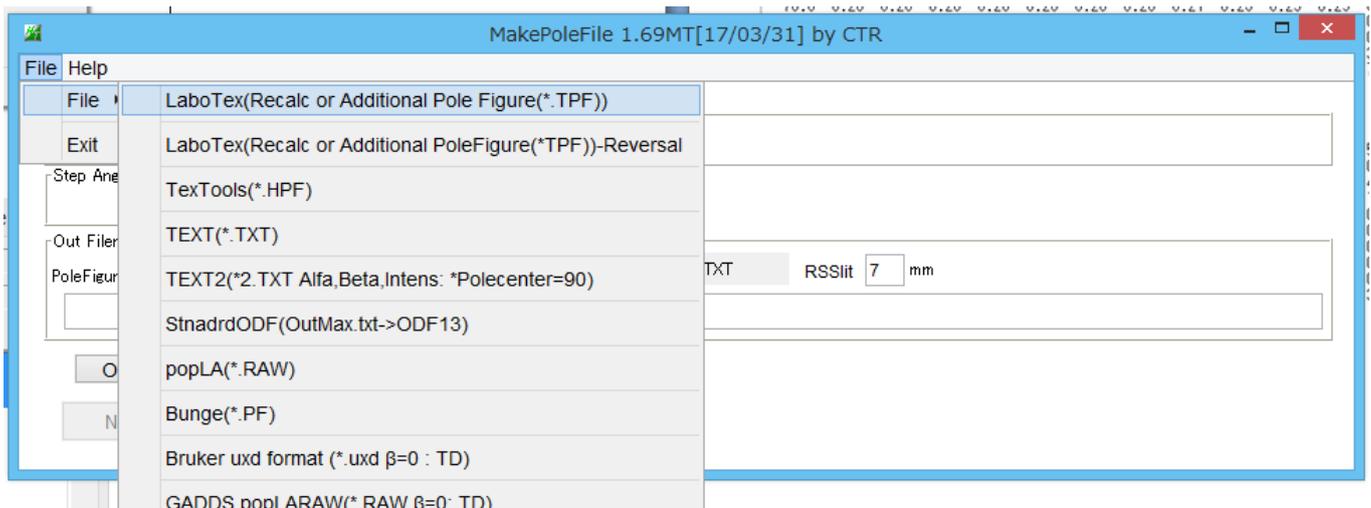
111.	0.0	5.0	10.0	15.0	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0	55.0	60.0	65.0	70.0	75.0	80.0	85.0	90.0	
0.0	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
5.0	0.23	0.23	0.24	0.23	0.22	0.22	0.22	0.22	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
10.0	0.59	0.62	0.66	0.66	0.54	0.40	0.33	0.30	0.27	0.24	0.22	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
15.0	3.19	2.90	2.29	1.76	1.34	0.86	0.50	0.35	0.29	0.24	0.21	0.21	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
20.0	4.34	3.94	3.08	2.21	1.40	0.78	0.45	0.30	0.24	0.21	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
25.0	2.65	2.43	1.82	1.14	0.70	0.50	0.44	0.42	0.38	0.32	0.27	0.23	0.21	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
30.0	4.16	3.56	2.36	1.38	1.01	1.24	1.74	2.03	1.77	1.19	0.68	0.37	0.25	0.21	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
35.0	8.90	7.37	4.41	2.11	1.47	2.30	3.72	4.54	3.85	2.36	1.10	0.45	0.25	0.21	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
40.0	3.78	3.29	2.16	1.16	0.84	1.18	1.73	2.01	1.82	1.26	0.69	0.35	0.23	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
45.0	0.58	0.55	0.47	0.37	0.32	0.35	0.43	0.65	1.04	1.24	0.94	0.49	0.27	0.21	0.21	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
50.0	0.22	0.22	0.21	0.21	0.21	0.23	0.43	1.38	3.28	4.44	3.29	1.40	0.51	0.34	0.29	0.24	0.21	0.20	0.20	0.20
55.0	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.23	0.49	1.87	4.93	6.94	4.95	2.02	1.04	1.15	1.02	0.66	0.37	0.24	0.21	0.21
60.0	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.21	0.35	1.12	2.93	4.14	2.97	1.40	1.63	3.10	3.40	1.85	0.60	0.25	0.20	0.20
65.0	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.23	0.37	0.75	1.03	0.79	0.66	1.41	2.69	2.73	1.40	0.48	0.24	0.21	0.21
70.0	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.21	0.23	0.25	0.25	0.30	0.46	0.69	0.80	0.58	0.31	0.22	0.20	0.20
75.0	0.23	0.22	0.21	0.21	0.22	0.21	0.21	0.20	0.20	0.21	0.23	0.25	0.25	0.25	0.26	0.24	0.22	0.23	0.24	0.24
80.0	0.77	0.63	0.42	0.45	0.53	0.40	0.26	0.21	0.23	0.34	0.63	0.85	0.61	0.32	0.22	0.23	0.33	0.62	0.85	0.85
85.0	3.89	2.69	1.30	1.57	2.06	1.27	0.47	0.24	0.30	0.89	2.62	3.91	2.45	0.79	0.29	0.29	0.84	2.54	3.91	3.91
90.0	6.74	4.43	1.99	2.68	3.64	2.13	0.65	0.26	0.36	1.42	4.67	7.09	4.26	1.19	0.33	0.34	1.30	4.47	7.09	7.09

ADDITIONAL POLE FIGURE

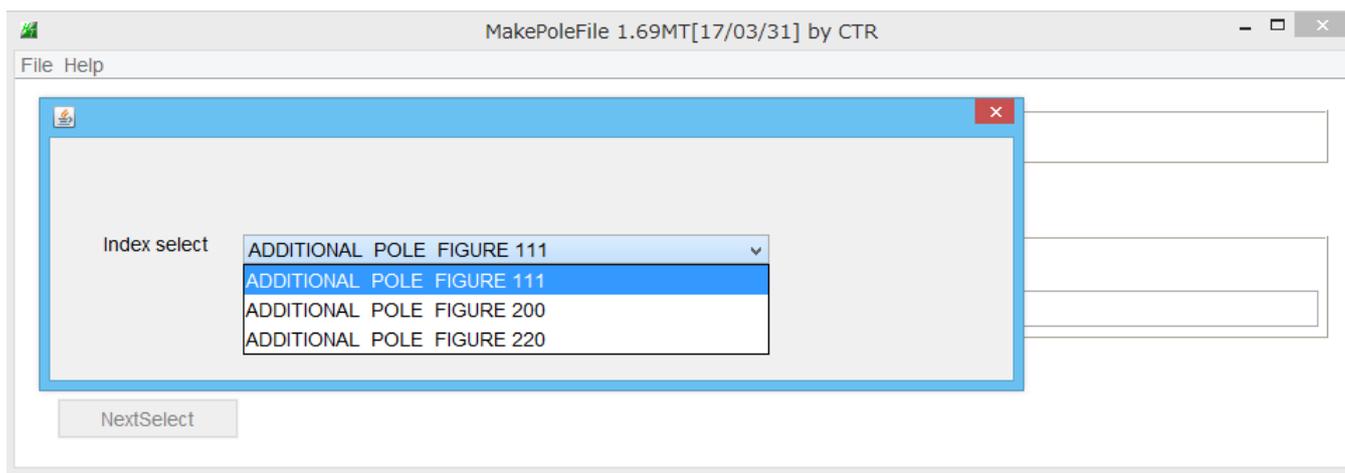
200.	0.0	5.0	10.0	15.0	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0	55.0	60.0	65.0	70.0	75.0	80.0	85.0	90.0	
0.0	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77	10.77
5.0	6.85	5.92	5.79	6.14	5.60	4.87	4.64	4.64	4.96	5.61	4.96	4.64	4.64	4.87	5.60	6.14	5.79	5.92	6.85	6.85
10.0	1.12	1.10	1.04	0.97	0.99	1.07	1.16	1.28	1.47	1.55	1.47	1.28	1.16	1.07	0.99	0.97	1.04	1.10	1.12	1.12
15.0	0.24	0.24	0.24	0.25	0.28	0.30	0.31	0.28	0.26	0.26	0.26	0.28	0.31	0.30	0.28	0.25	0.24	0.24	0.24	0.24
20.0	0.22	0.22	0.21	0.21	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
25.0	0.75	0.63	0.44	0.31	0.25	0.22	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
30.0	3.18	2.41	1.37	0.76	0.41	0.26	0.22	0.21	0.21	0.21	0.22	0.22	0.22	0.21	0.21	0.21	0.21	0.22	0.23	0.25
35.0	5.86	4.34	2.24	1.08	0.51	0.28	0.22	0.22	0.27	0.37	0.57	0.69	0.54	0.37	0.30	0.35	0.54	0.91	1.19	1.19
40.0	3.40	2.56	1.36	0.68	0.36	0.24	0.22	0.29	0.54	1.19	2.46	3.31	2.31	1.12	0.65	0.90	2.09	4.57	6.42	6.42

テキストデータや ASC データに変換

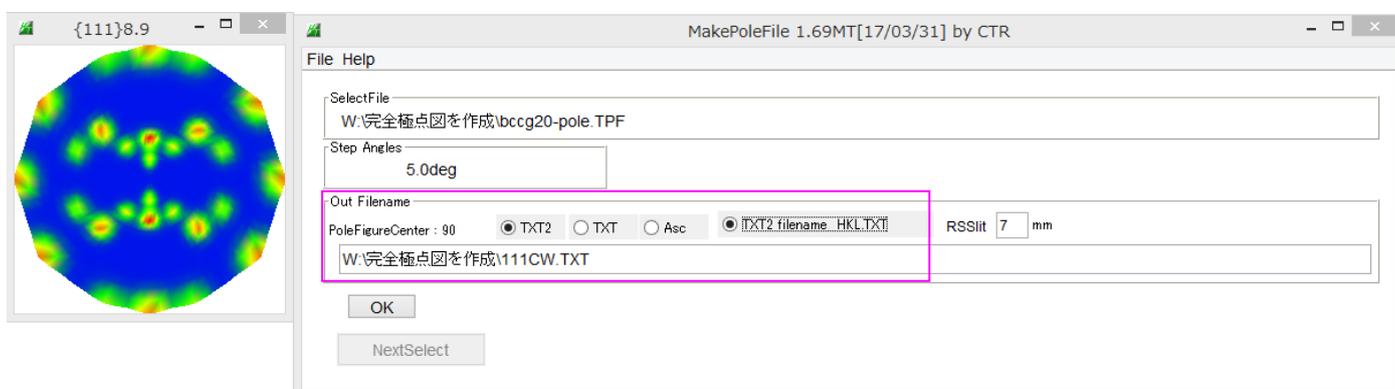
ODFPoleFigure2->ToolKit->ODFAfter->MakePoleFile で Export したファイルを選択



Export された個々の極点図を選択



作成するデータのタイプを指定して OK



極点図の選択を繰り返すと複数のファイルが作成される。

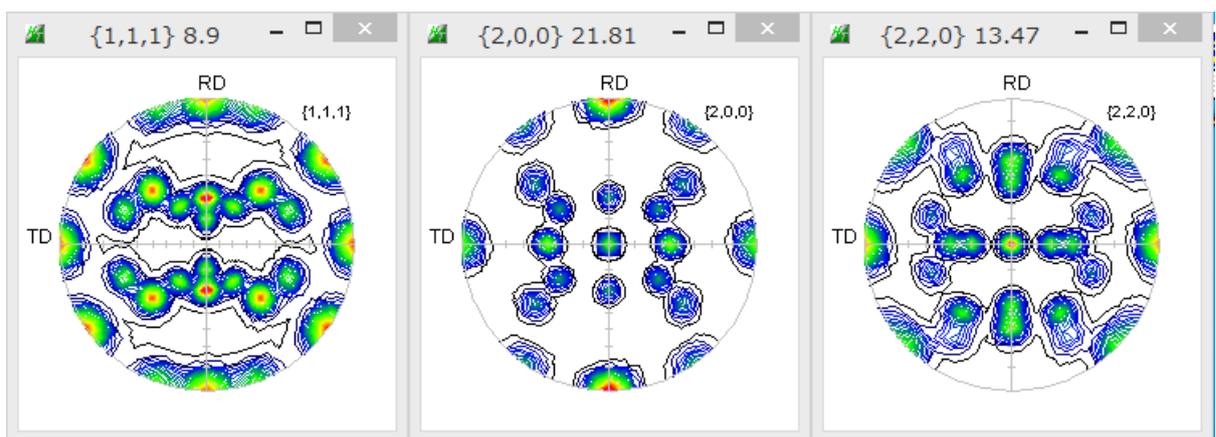
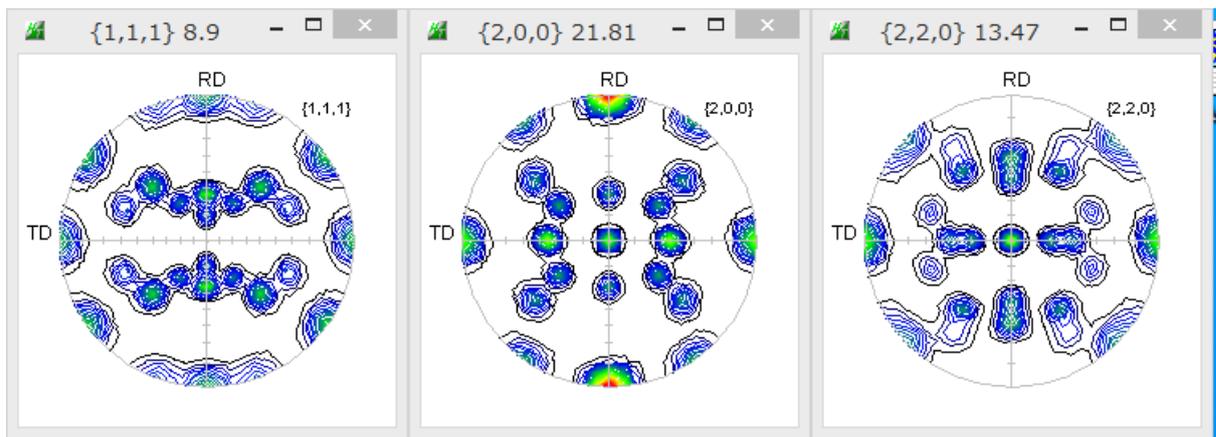
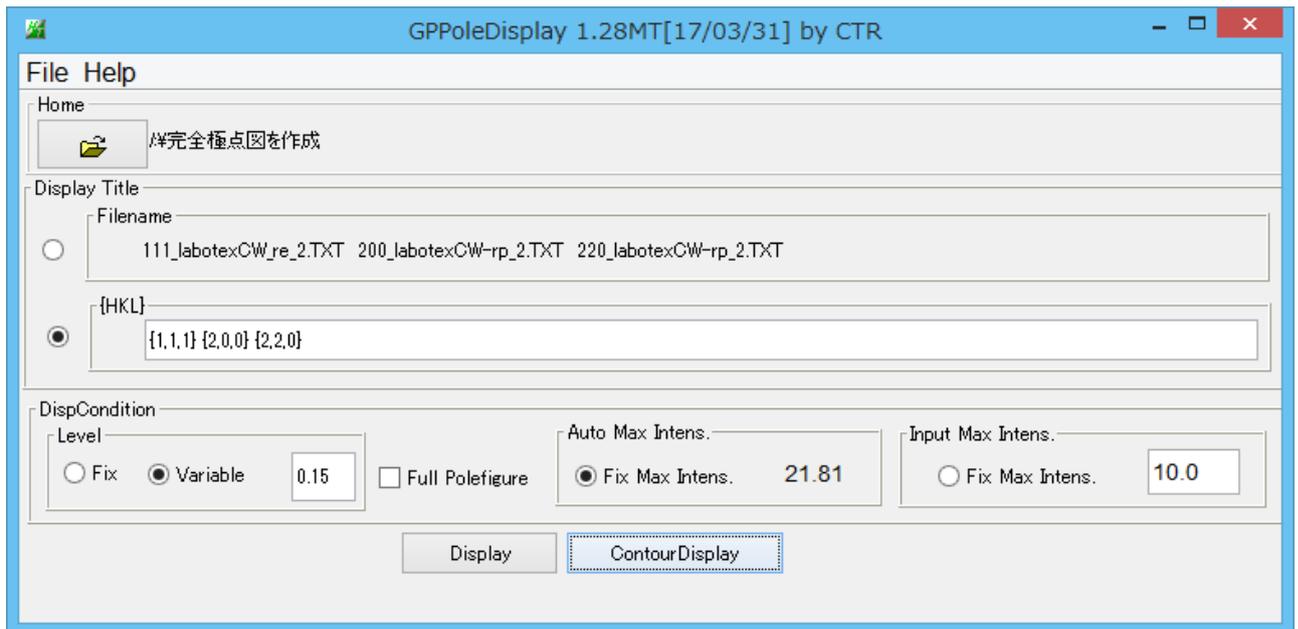
名前	更新日時	種類	サイズ
bccg20-pole.TPF	2016/10/18 2:59	TPF ファイル	8 KB
111_labotexCW_re_2	2016/10/18 3:11	テキスト文書	23 KB
200_labotexCW-rp_2	2016/10/18 3:11	テキスト文書	23 KB
220_labotexCW-rp_2	2016/10/18 3:11	テキスト文書	23 KB

極点図の中心  $\alpha$  角度を 90 度とした ( $\alpha$ 、 $\beta$ 、極密度) が作成される。

α (deg)	β (deg)	Intensity
0.0	0.0	6.74
0.0	5.0	4.43
0.0	10.0	1.99
0.0	15.0	2.68
0.0	20.0	3.64
0.0	25.0	2.13
0.0	30.0	0.65
0.0	35.0	0.26
0.0	40.0	0.36
0.0	45.0	1.42
0.0	50.0	4.67
0.0	55.0	7.09
0.0	60.0	4.26

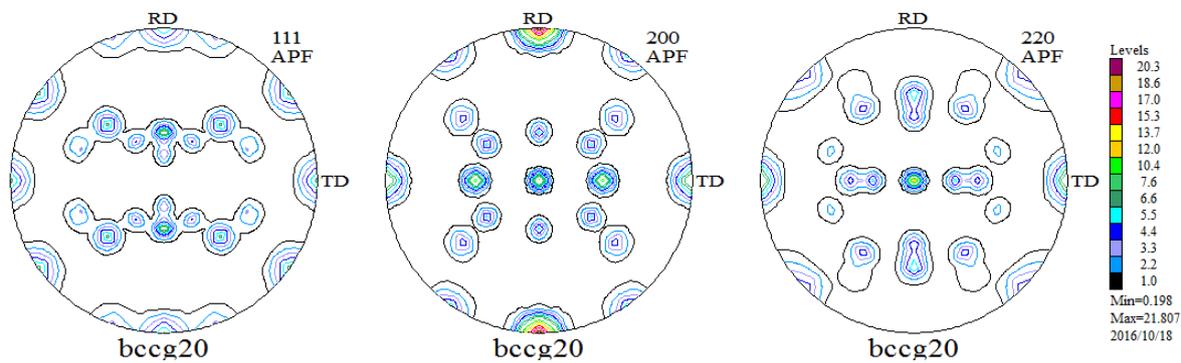
作成された極点図の描画

ODFPoleFigure2->ToolKit->ODFAfter->GPPoleDisplay で TXT2 ファイルを選択

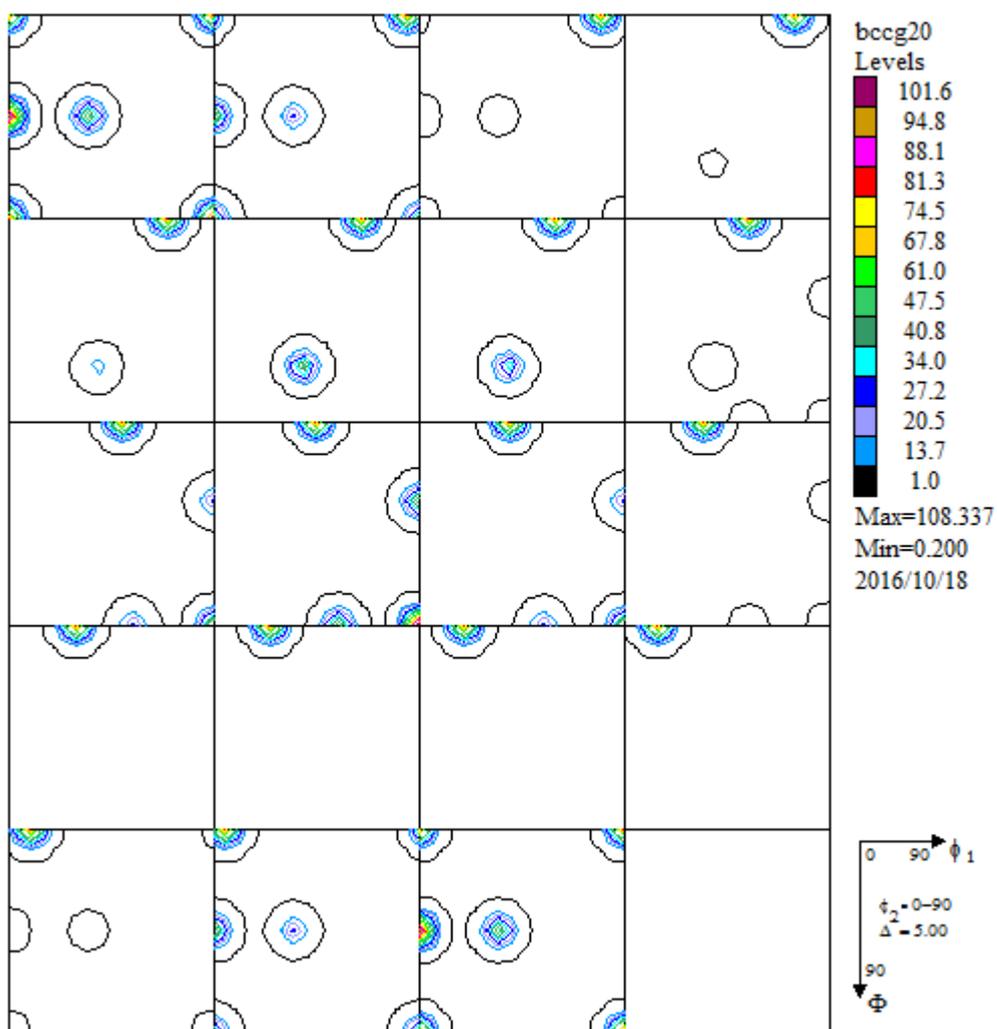


実際の極点図から結晶方位の定量  
今までの流れの逆を行います。

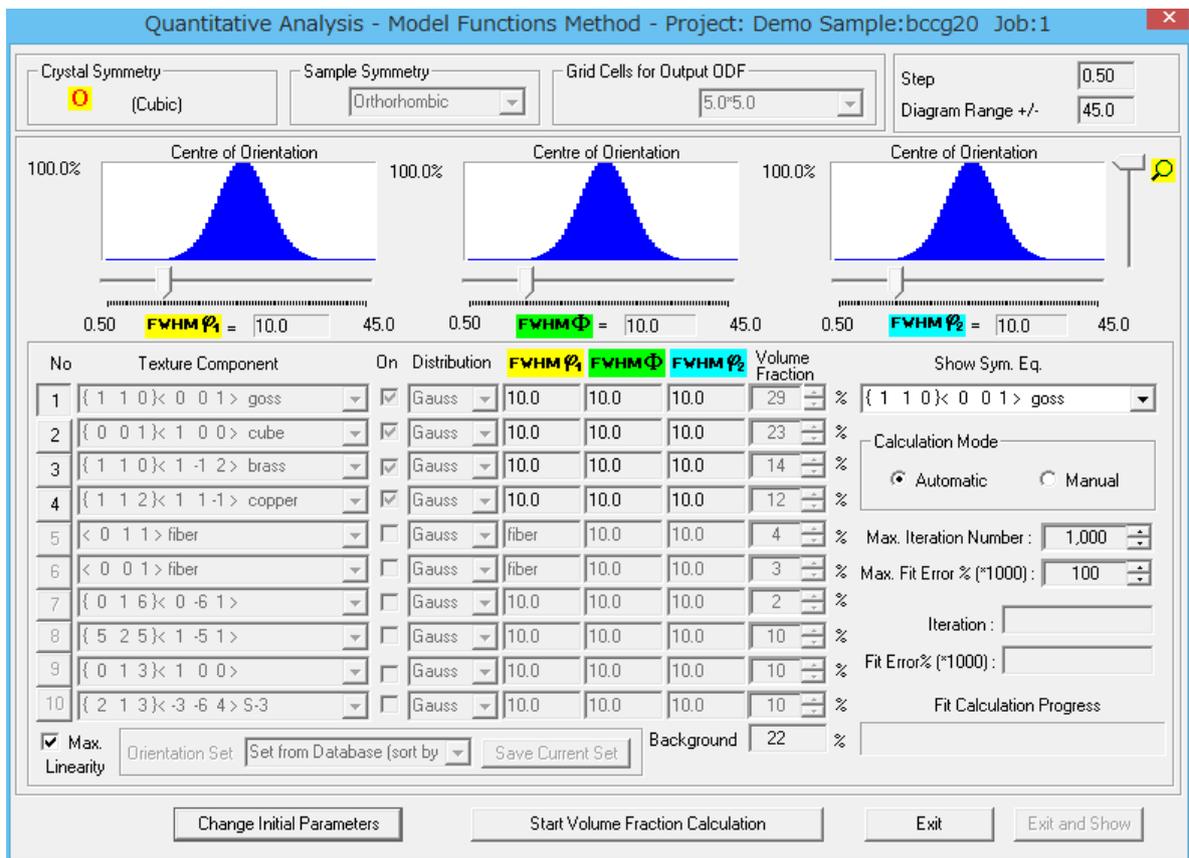
入力極点図



入力極点図から ODF 解析結果

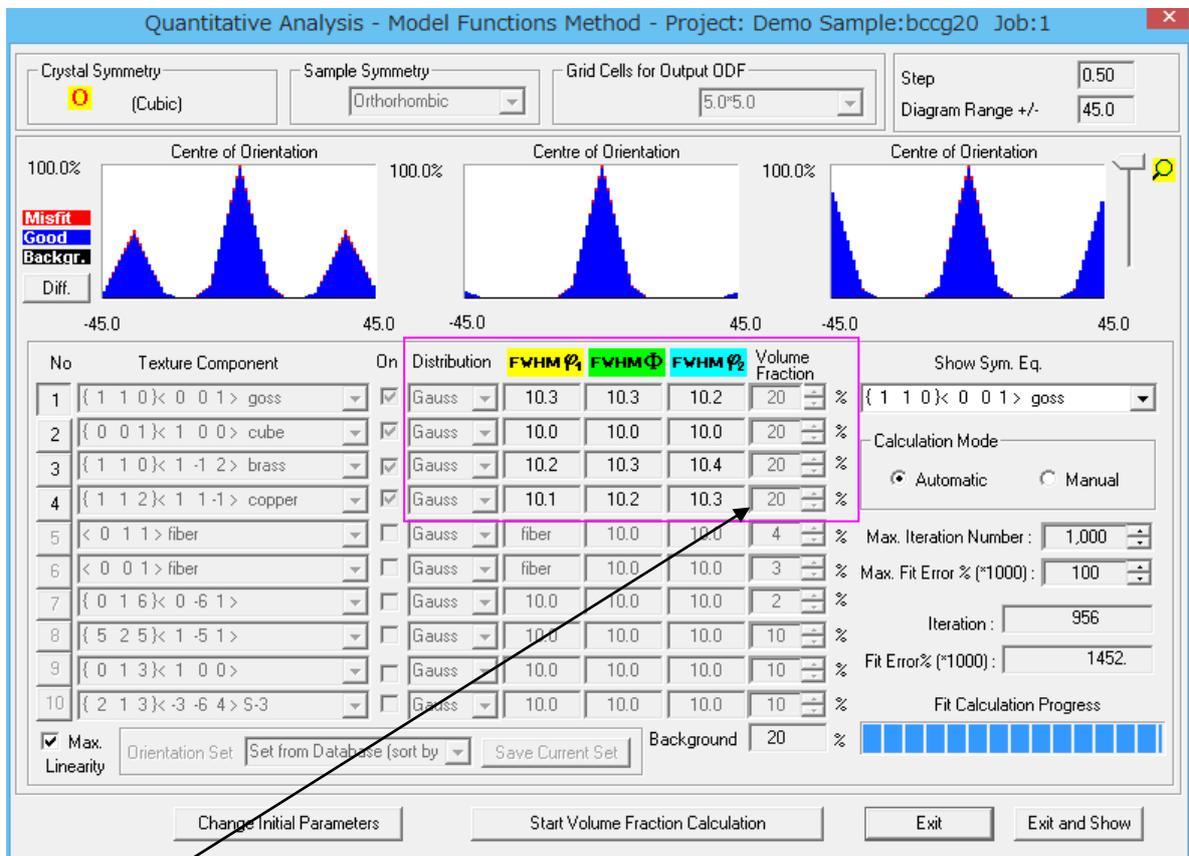


# ODF 図から VolumeFraction



Start Volume Fraction Calculation

で計算を開始



定量値を求めます。