

LaboTexによる非対称極点図の解析

LaboTexのODF解析は極点図がCW方向に回転したデータに対して計算を行う。CCWのデータで計算を行った場合、再計算極点図がRD軸に対して反転した極点図になるが、TexToolsなどと同じ形のODF図が得られる。非対称極点図からVolumeFractionを求める場合、非対称ODF解析で正確なODF図、再計算極点図、VolumeFractionが得られる。

2016年02月17日

HelperTex Office

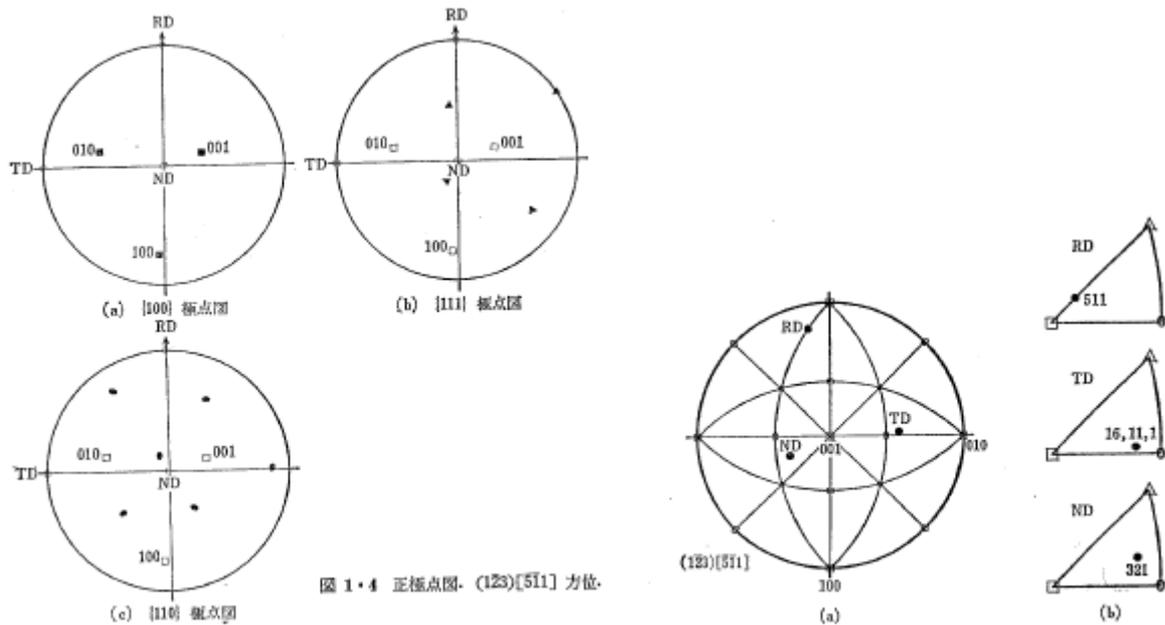
概要

材料の異方性を評価する際、極点図が1/4対称にならないことがあります。
 このような場合、以降の解析は非対称で解析を行わなければなりません。
 非対称解析に関して、長嶋晋一先生「集合組織」で扱われている方位(1-23)[-5-11]を例にして
 解析を行ってみます。

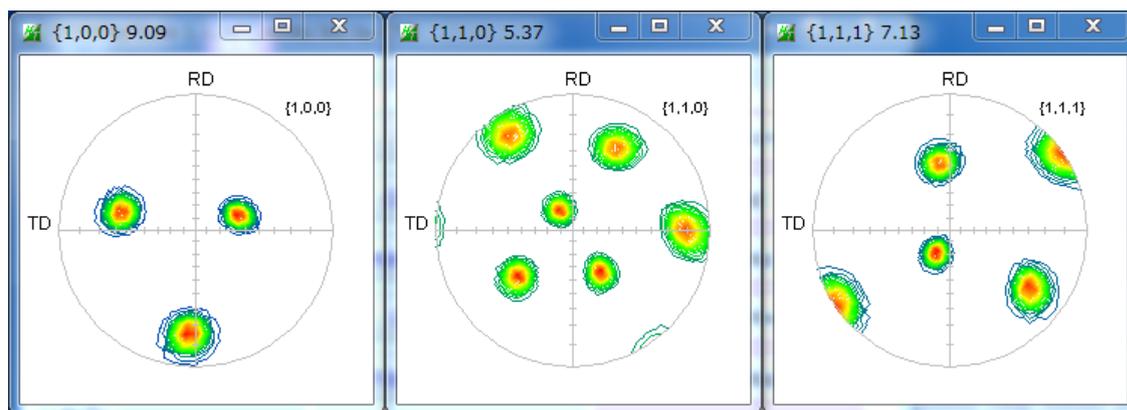
LaboTexは、入力極点図の正規回転方向はCW方向[時計の回転方向]で、TD方向は極点図の右側
 です。CWで非対称解析、対称解析の比較を行ってみます。

又、TexToolsと同じCCW方向でも解析を行ってみます。

「集合組織」の方位(1-23)[-5-11]、TD方向は極点図の左側で表記されています。



作成した(1-23)[-5-11]極点図 (極点図ステップ間隔は5度)



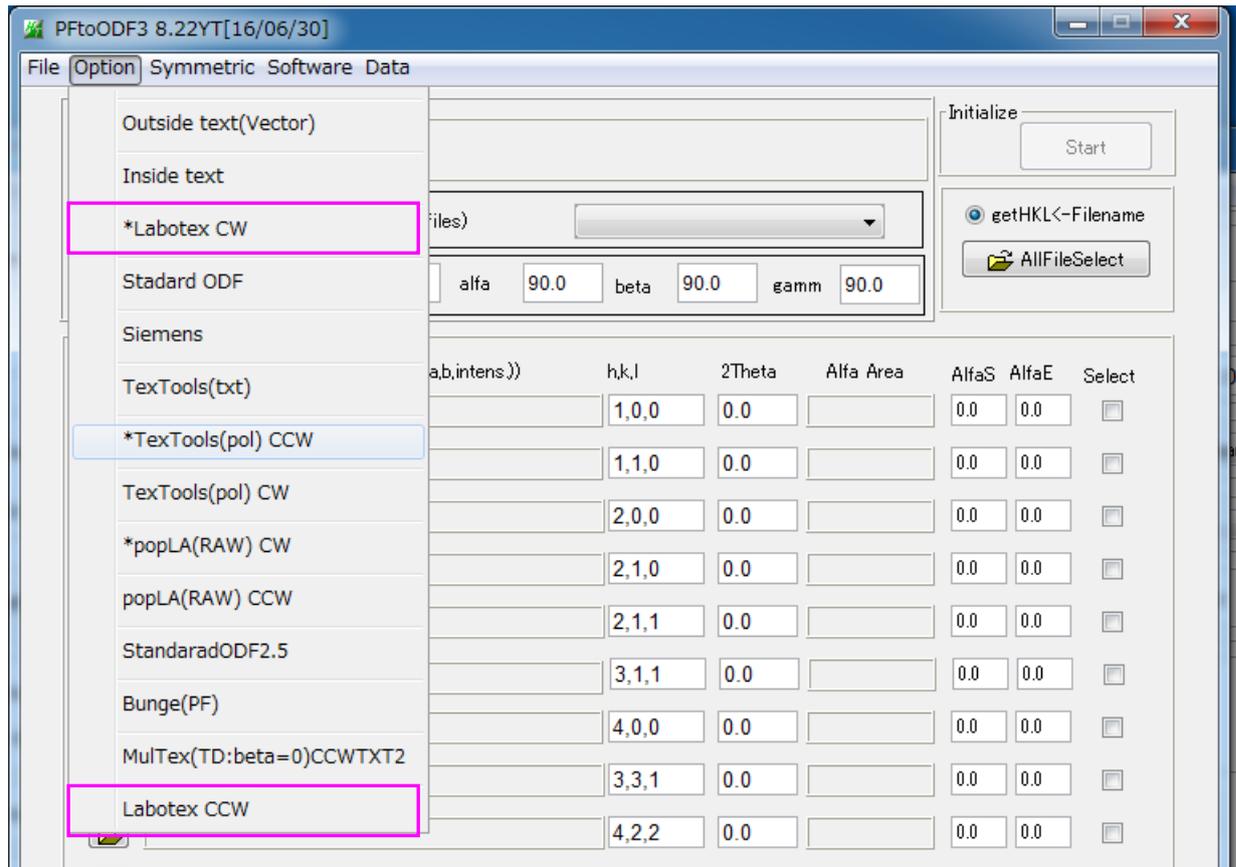
(1-23)[-5-11]の Euler 角度

Miller Indices							
(hkl)[uvw]	1	-2	3	-5	-1	1	Calc
Euler Angle							
(p1 P p2) <=90	18.7858	36.6992	153.4349				Calc

通常のODFでは、 ϕ 2 断面は90度以内である。

測定解析データからLaboTex向け、CWデータの作成

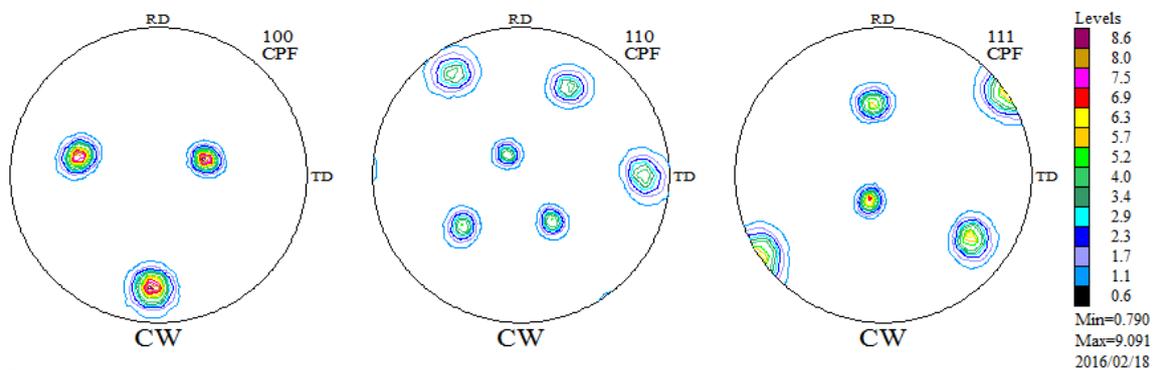
PFtoODF3 ソフトウェアで*Labotex(CW)を選択



LaboTexCCW で LaboTexls 向けファイルを作成して ODF 解析を行うと、

LaboTex の入力極点図が RD 軸に反転し、ODF の ϕ 2 断面がシフトされた結果になります。

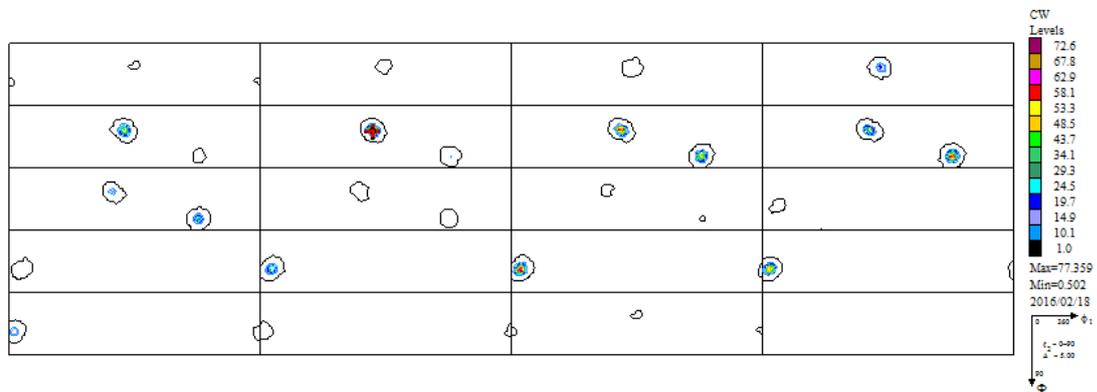
LaboTex 入力極点図



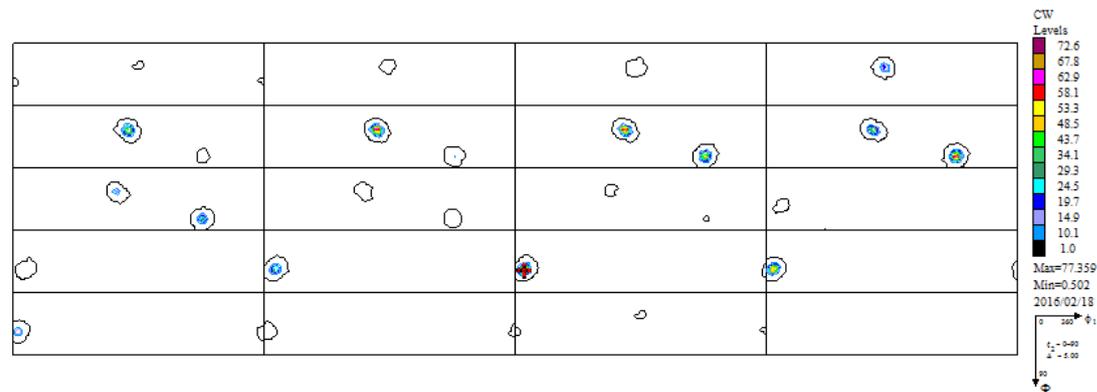
非対称ODF解析

作成されるODFファイル ($\phi 1$ 、 Φ 、 $\phi 2$) は (360, 90, 90) が作成され、 $(123)[-511]$, $(312)[1-51]$, $(231)[11-5]$ が検出される。

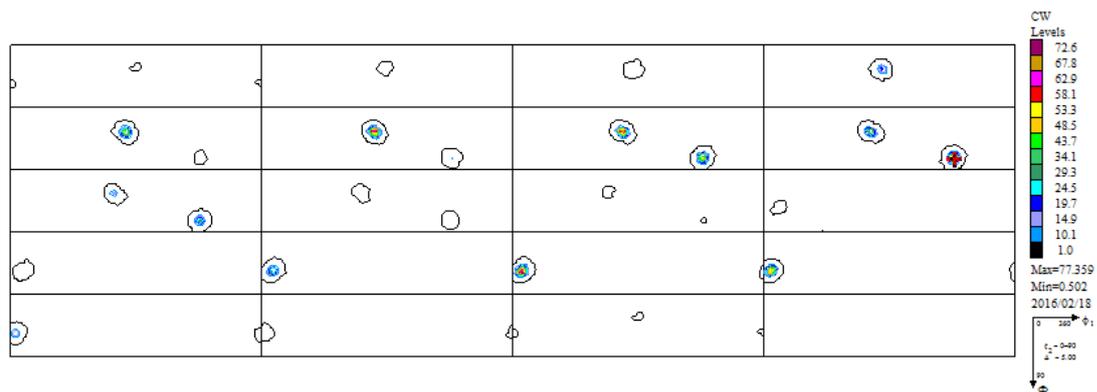
Step 5.00 $\phi_1=161.21$ $\Phi=36.70$ $\phi_2=26.57$ HKL (1 2 3) Uvw [-5 1 1]



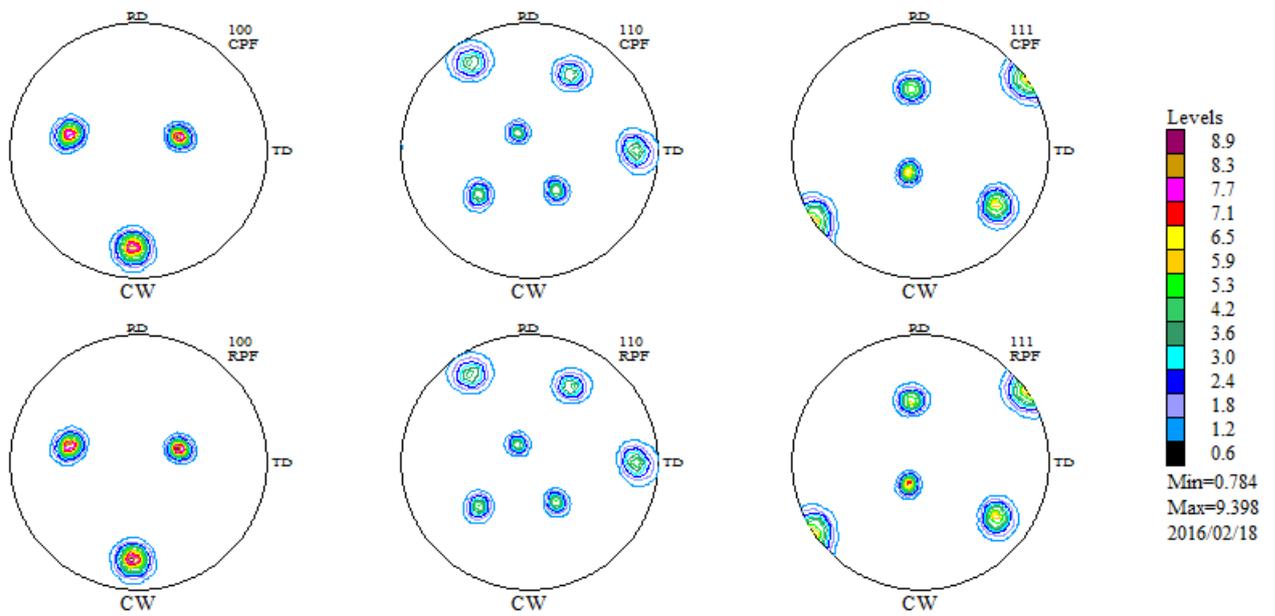
Step 5.00 $\phi_1=13.16$ $\Phi=57.69$ $\phi_2=71.57$ HKL (3 1 2) Uvw [1 -5 1]



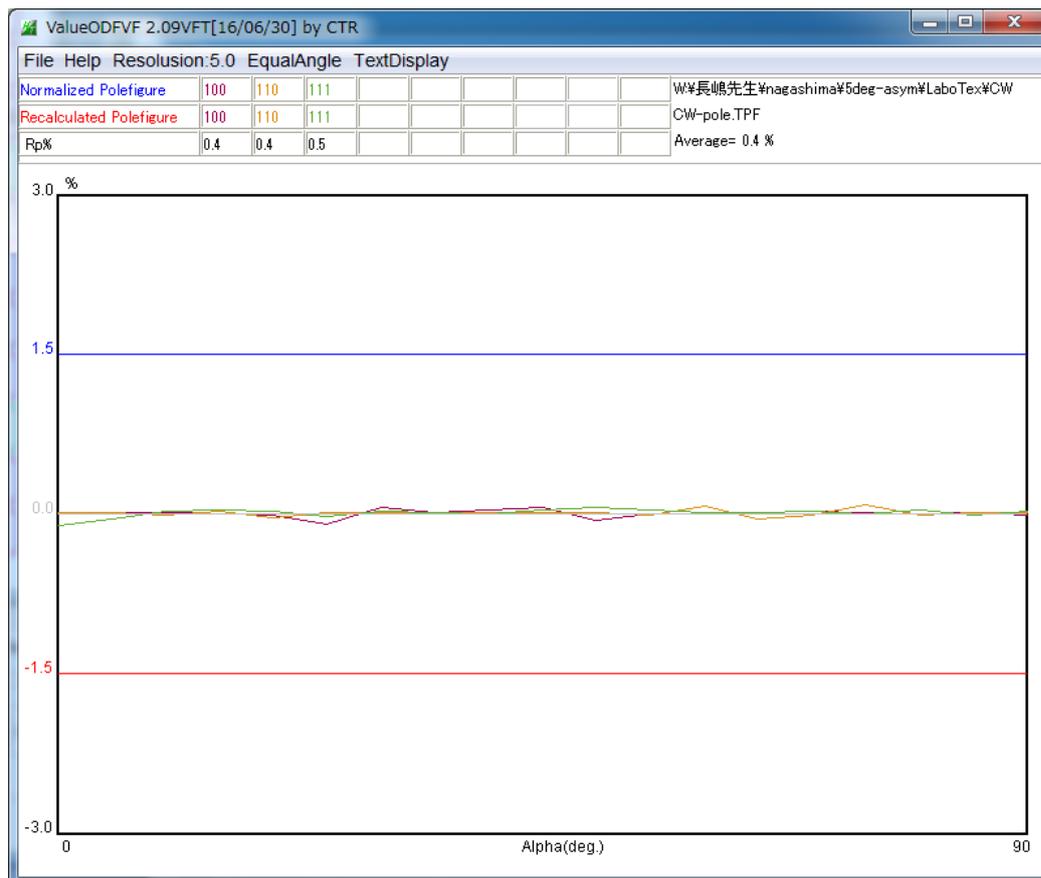
Step 5.00 $\phi_1=273.06$ $\Phi=74.50$ $\phi_2=33.69$ HKL (2 3 1) Uvw [1 1 -5]



入力極点図と再計算極点図の比較



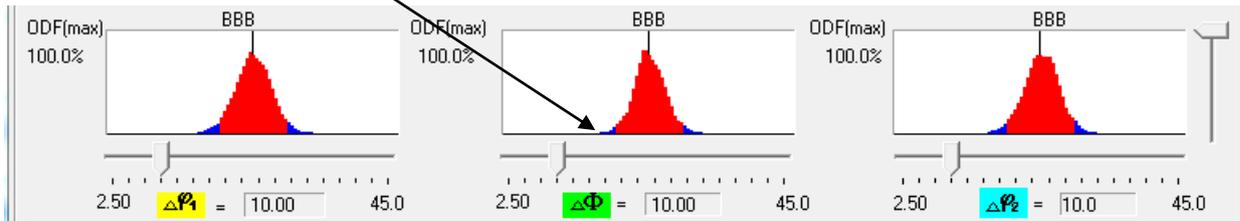
入力極点図と再計算極点図から入力極点図の $Erro r R p \%$ を計算する。



$R p \% = 0.4 \%$ で $Erro r$ は検出されません。

Volume Fraction 計算 (Quantitative Analysis - Integration Methods)

検出された方位に対し FWHM で広がり調整して定量を行う。



Quantitative Analysis - Integration Methods - Project: asym Sample: CW Job: 1

Orientation Set Name: Set from Database (sort by ODF) Save Current Set

Step: 2.50 Diagram Range +/-: 45.0 CP Central View Point (Diagrams): View CP BBB

No	Texture Component	On	$\Delta\phi_1$	$\Delta\Phi$	$\Delta\phi_2$	Volume Fraction [%]	[ϕ_1 , Φ , ϕ_2]
1	{ 1 2 3 } < -5 1 1 >	<input checked="" type="checkbox"/>	15.00	15.00	15.00	19.97	{ 1 2 3 } < -5 1 1 >
2	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		[161.21, 36.70, 26.57]
3	{ 3 2 3 } < 1 -3 1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		[13.16, 57.69, 71.57] (Sym.Eq.)
4	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		[273.06, 74.50, 33.69] (Sym.Eq.)
5	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
6	{ 2 3 3 } < 0 1 -1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
7	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
8	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
9	{ 1 2 2 } < 2 -2 1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
10	{ 1 1 3 } < 1 -1 0 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%

Background: 50.23 %
The Rest: 29.79 %
Orientations Overlap: 0.00 %

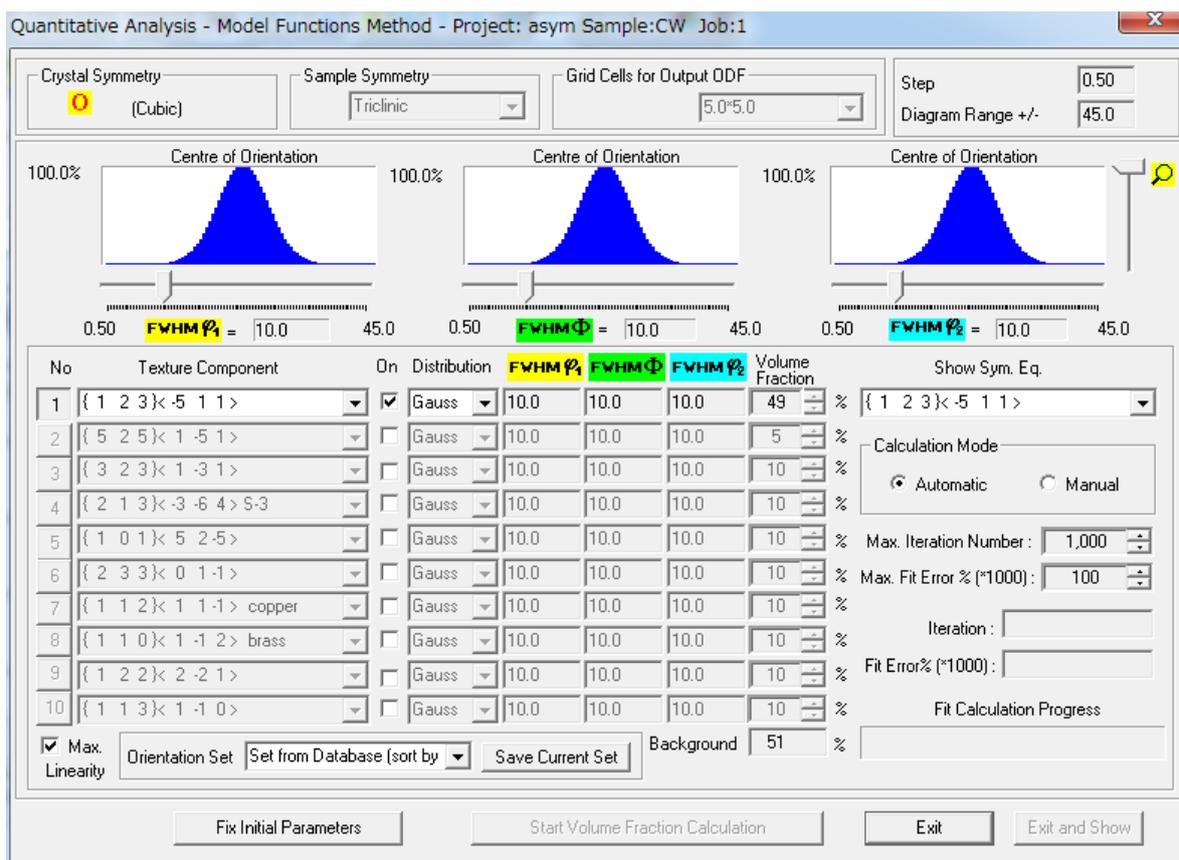
Overlapping of Sym. Eq. Or. Strategy:
 Simple Integration
 Singly Counts in Overlapp. Area
 Divide by Number of Sym. Equival.

Overlapping of Orientations:
 Divide ODF Among Overlap. Orient.

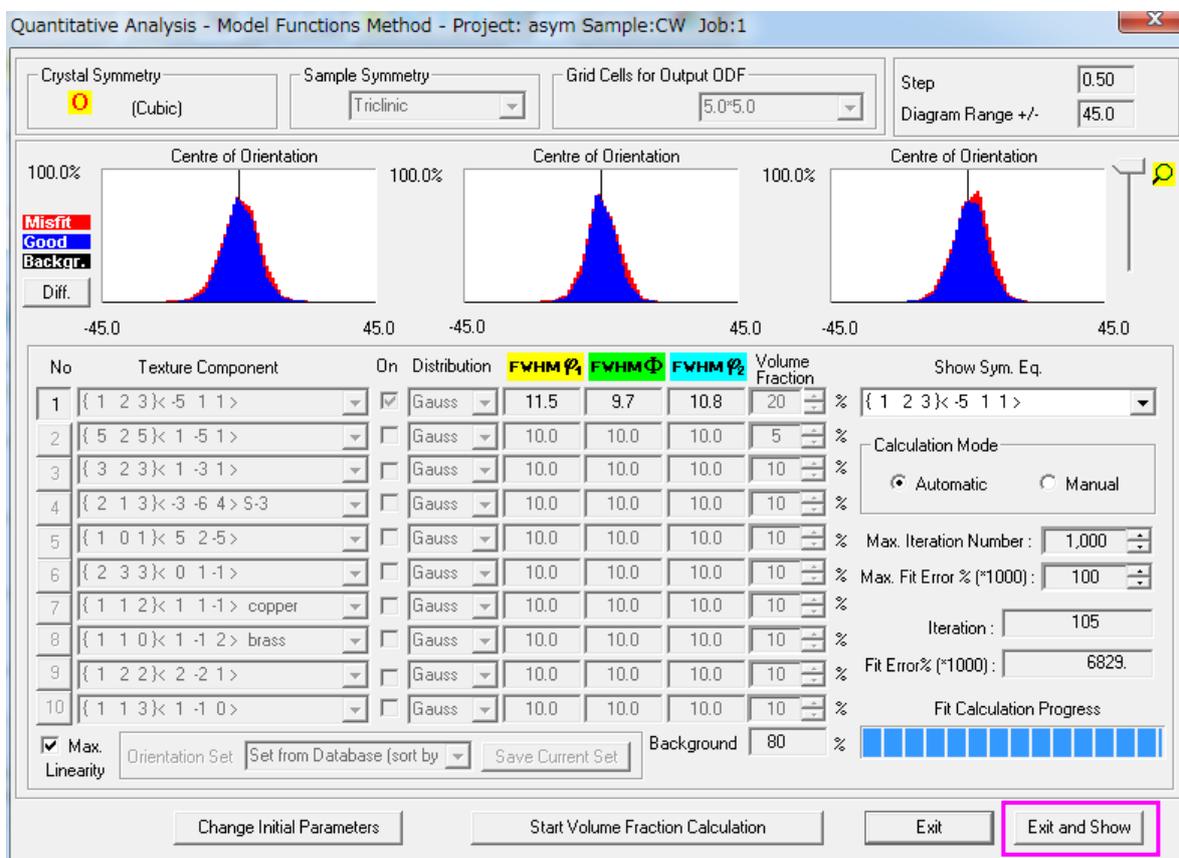
Calculate Volume Fraction of Texture Components View Report Close

定量値、19.97%が得られます。

Volume Fraction 計算 (Quantitative Analysis - Model Functions Method)



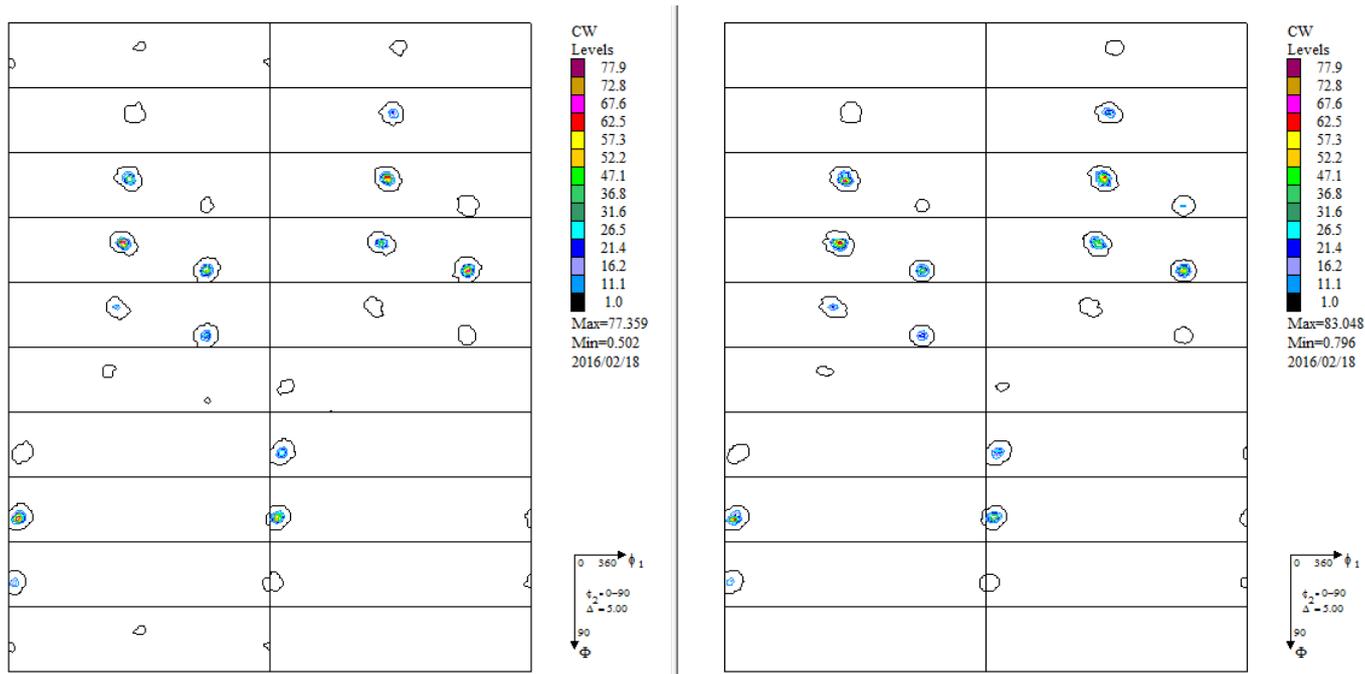
自動的に検出された、(123)[-511]方位を Gauss 関数で自動定量を行う。



定量値 20% が得られます。

定量された Volume Fraction から再計算 ODF 図で検証が行えます。

入力データから計算した ODF 図と VolumeFraction から再計算した ODF 図の比較



若し、ODF 図の形状が異なる場合、新たな方位を追加して再度計算します。

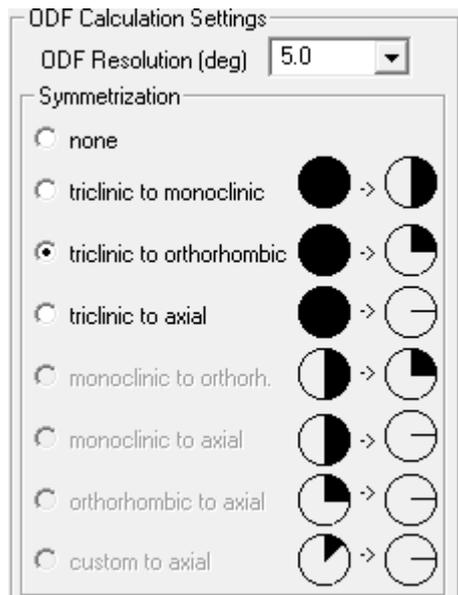
ODF 間の Error を再計算極点図間で Rp % を計算する。



Rp % は 0.4 % と計算され、Error は見当たりません。

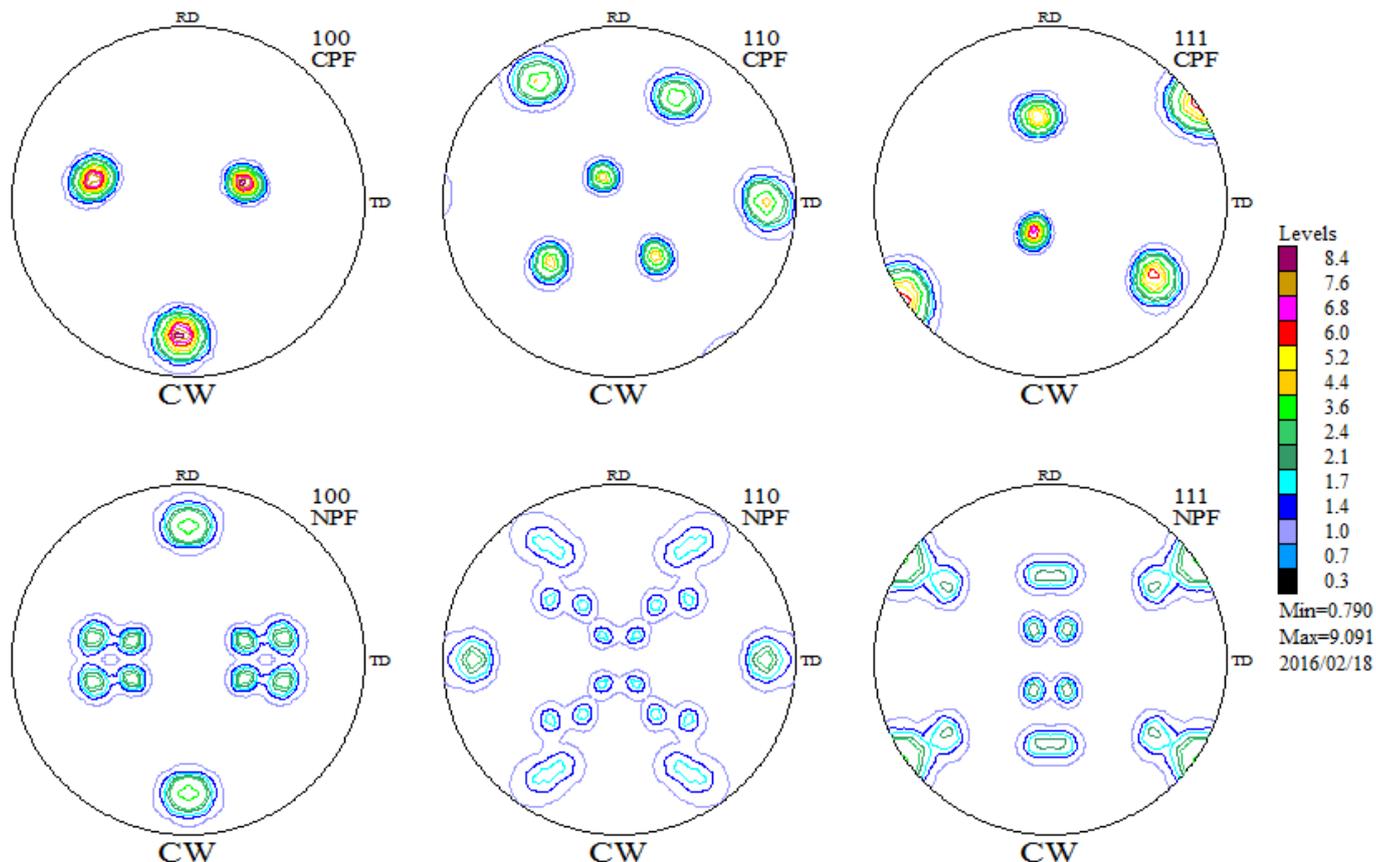
非対称極点図の対称極点図解析

L a b o T e x では以下の対称操作があります。



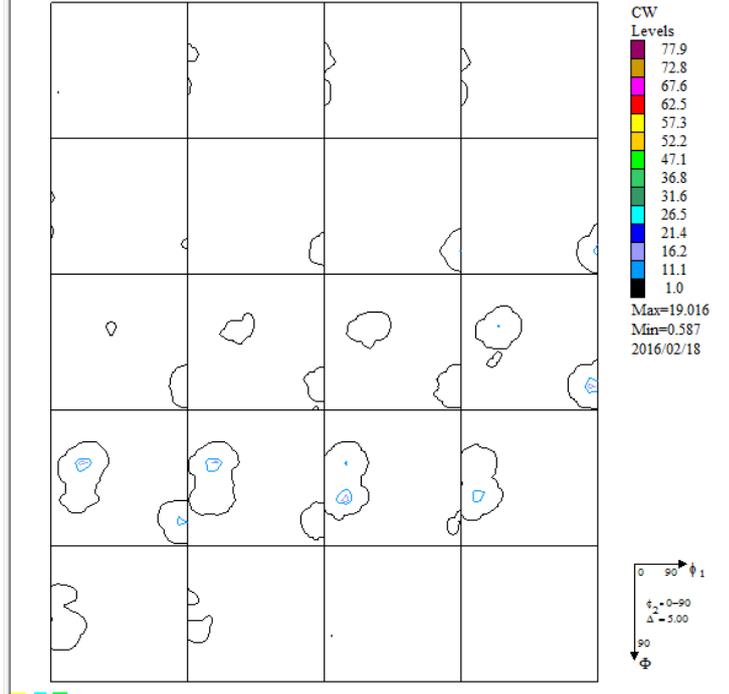
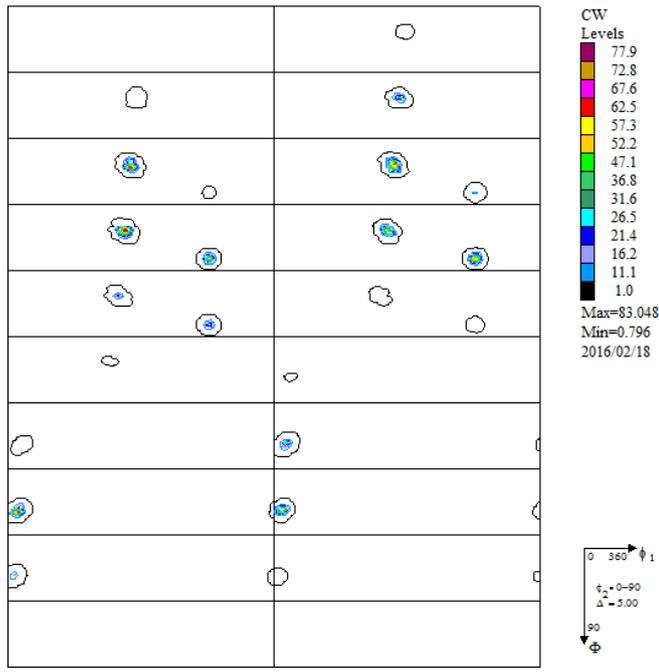
T e x T o o l s と同じ、1/4 対称を行ってみます。

入力極点図（上段）に対して、1/4 対称操作（下段）



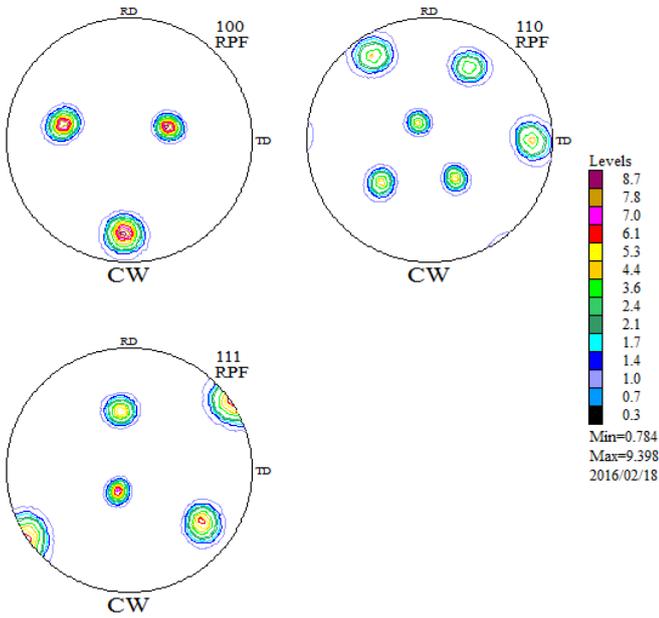
1 / 4 対称操作ODF 図

1 / 4 対称操作（右図）で極端に方位密度が低下しているのが分かります。

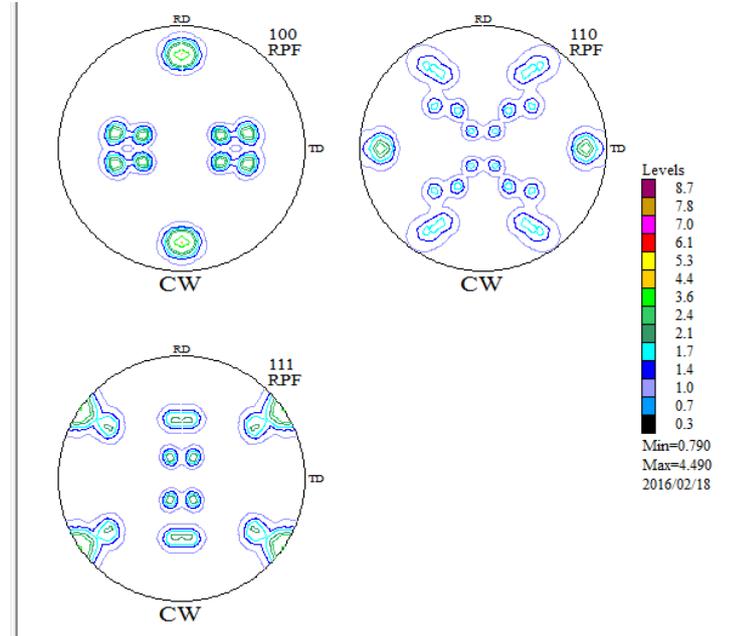


再計算極点図の比較

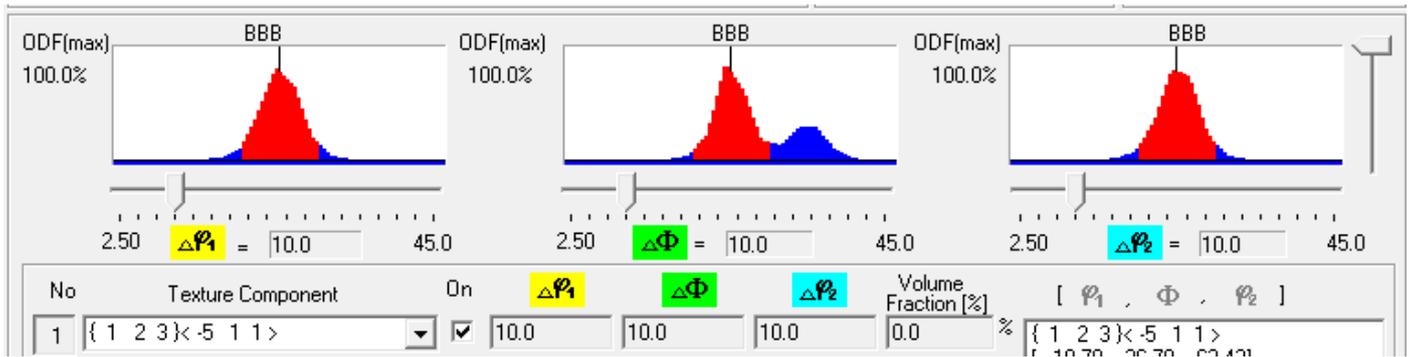
360 非対称再計算極点図



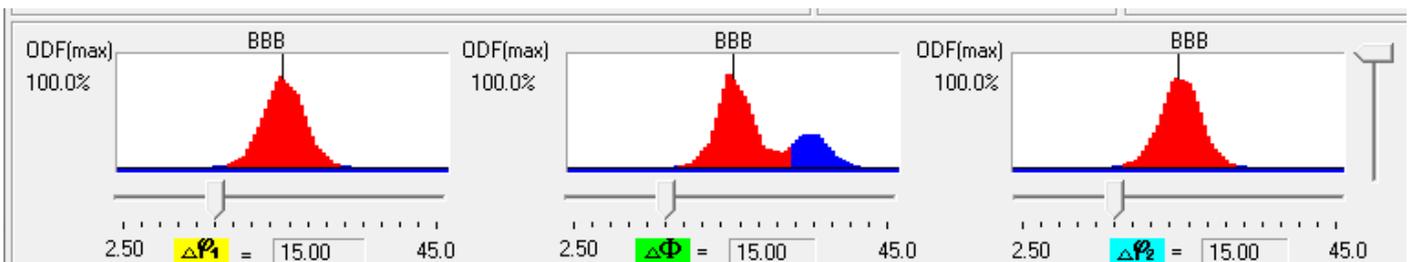
1 / 4 対称操作再計算極点図



Volume Fraction (Quantitative Analysis - Integration Methods)



Φ 断面に余分な山が検出されています。



非対称と同様に±15では

Quantitative Analysis - Integration Methods - Project: asym Sample: CW Job: 3

Orientation Set Name: Set from Database (sort by ODF) Save Current Set

Step: 2.50 Diagram Range +/-: 45.0 CP

Central View Point (Diagrams): View CP BBB

No	Texture Component	On	$\Delta\phi_1$	$\Delta\phi$	$\Delta\phi_2$	Volume Fraction [%]	$[\phi_1, \phi, \phi_2]$
1	{ 1 2 3 } < -5 1 1 >	<input checked="" type="checkbox"/>	15.00	15.00	15.00	19.37	{ 1 2 3 } < -5 1 1 >
2	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		[18.79, 36.70, 63.43]
3	{ 3 2 3 } < 1 -3 1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		[13.16, 57.69, 71.57] (Sym.Eq.)
4	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		[86.94, 74.50, 56.31] (Sym.Eq.)
5	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
6	{ 2 3 3 } < 0 1 -1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
7	{ 1 1 3 } < 1 -1 0 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
8	{ 1 2 2 } < 2 -2 1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
9	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%
10	{ 1 1 1 } < -1 -1 2 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0		%

Background: 58.67 %
The Rest: 21.96 %
Orientations Overlap: 0.00 %

Overlapping of Sym. Eq. Or. - Strategy:
 Simple Integration
 Singly Counts in Overlapp. Area
 Divide by Number of Sym. Equival.

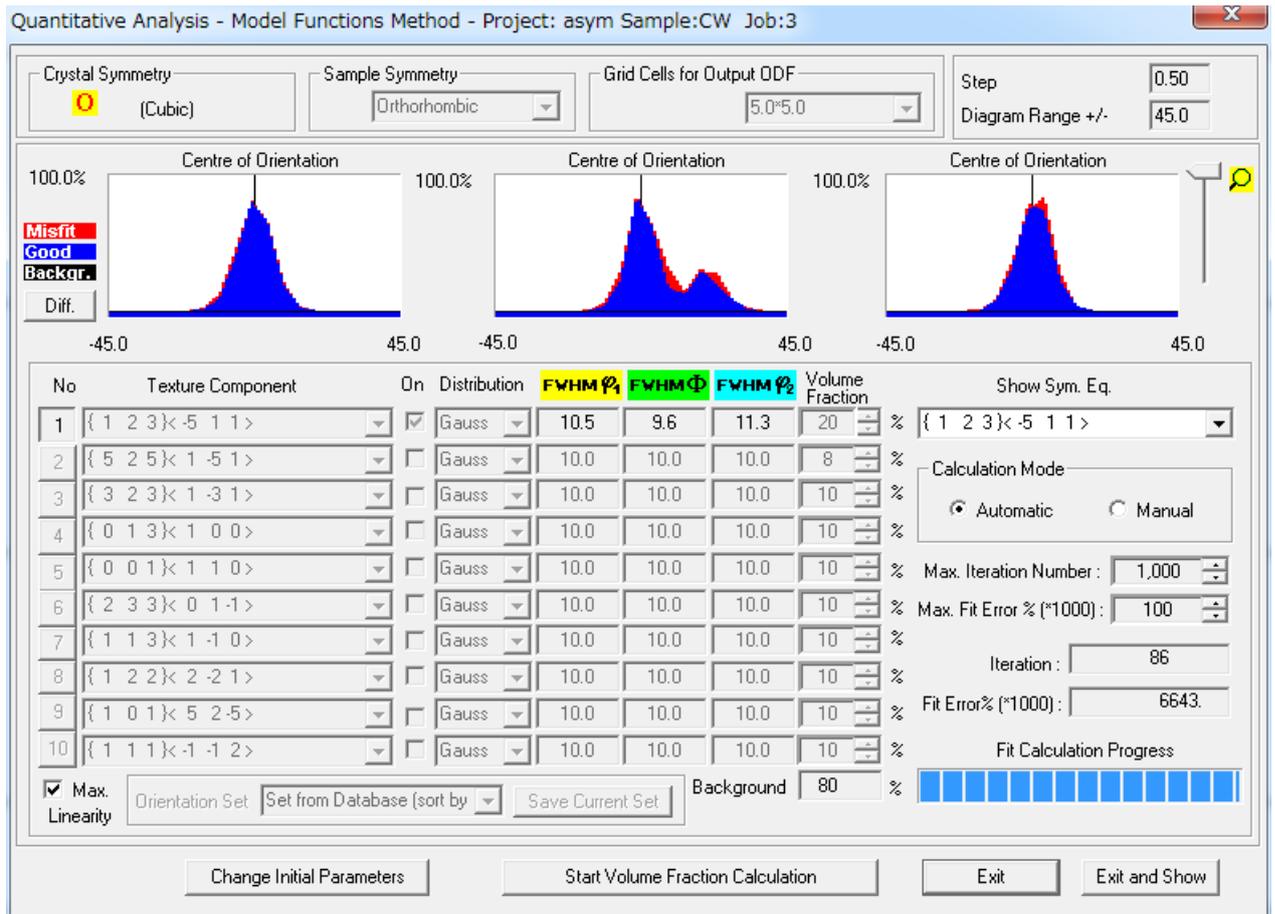
Overlapping of Orientations:
 Divide ODF Among Overlap. Orient.

Calculate Volume Fraction of Texture Components

View Report Close

定量値が非対称19.97%から19.37%に低下しています。

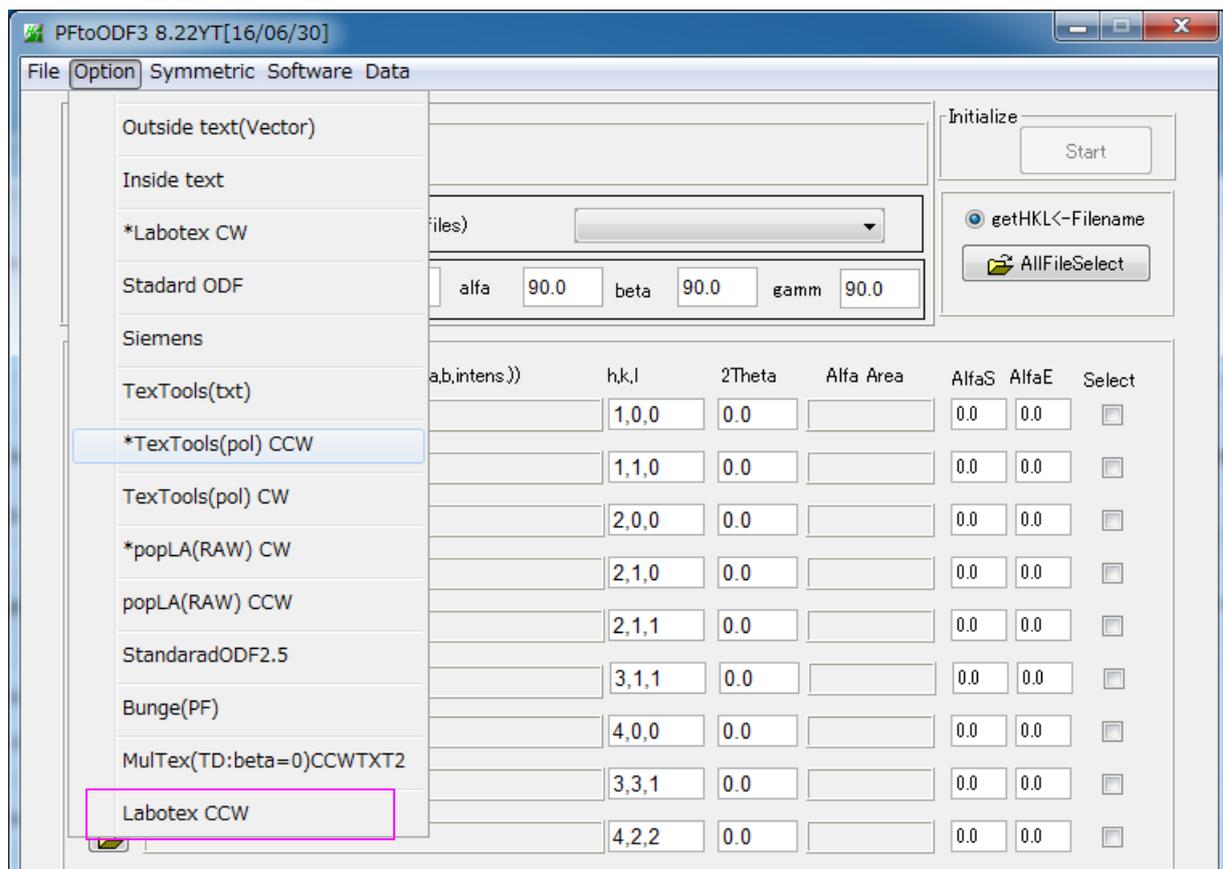
Volume Fraction (Quantitative Analysis - Model Functions Method) では



G a u s s 関数により自動的に定量値 20%が得られます。

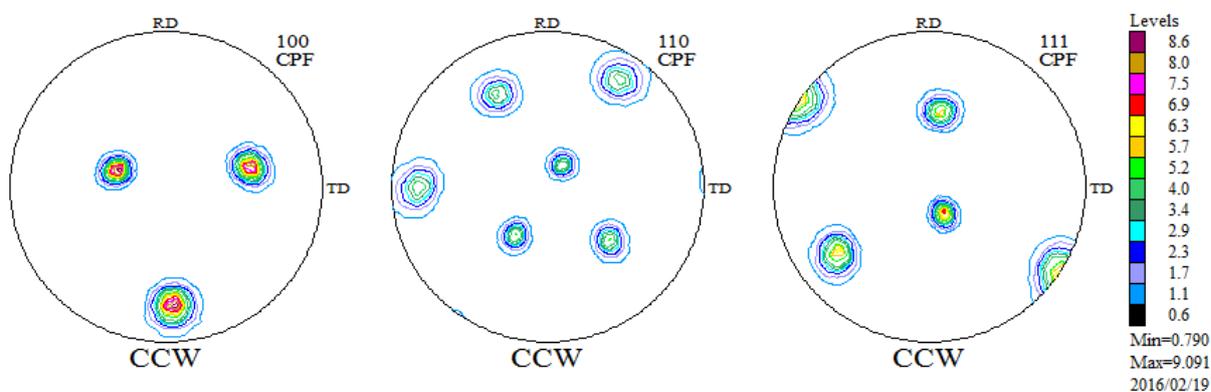
このように非対称極点図を対称操作により VolumeFraction が求められる事もあります。

データの回転方向を反時計回り（CCW）でデータの並び替えを行った場合



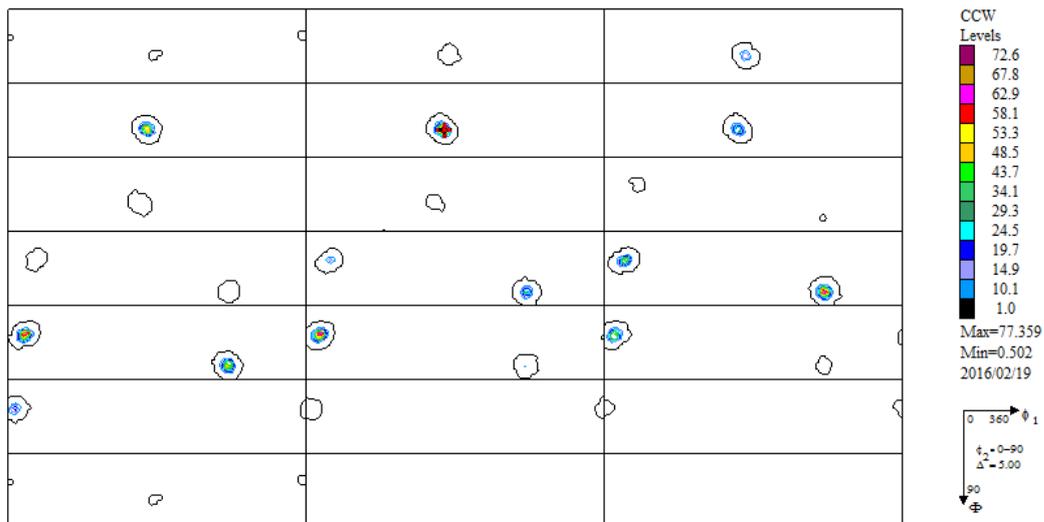
LabotexCCW でデータを作成する。

L a b o T e x に読み込むと、データは反転して読み込まれます。

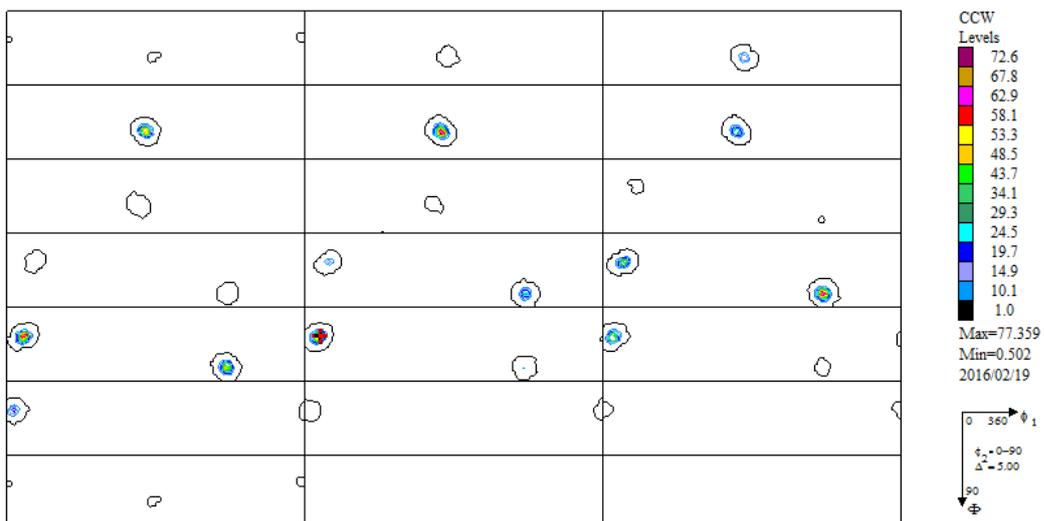


ODF解析を行うと、ODF結果はTextToolsのCCWと一致します。

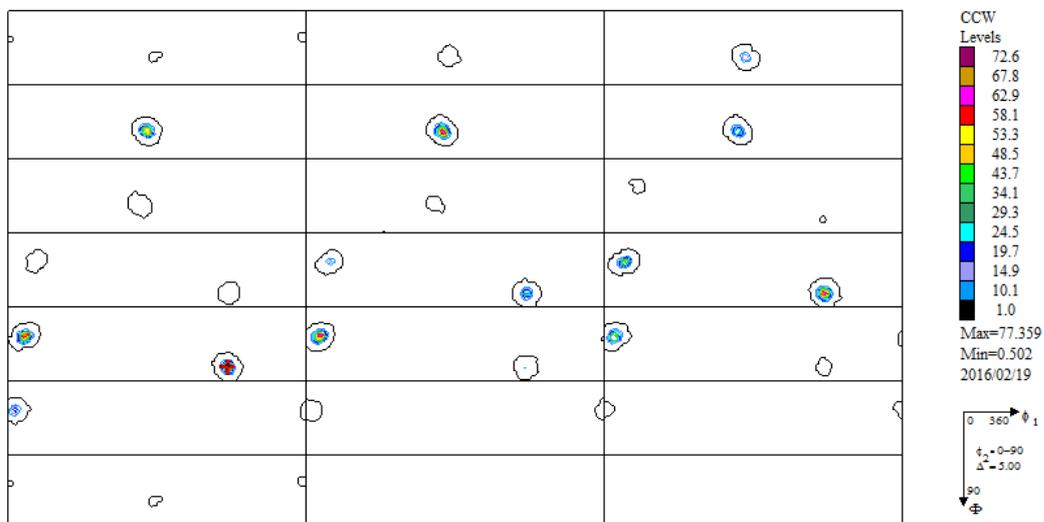
Step 5.00 $\varrho=$ 166.84 $\Phi=$ 57.69 $\varrho=$ 18.43 HKL (1 3 2) UVW (-5 1 1)



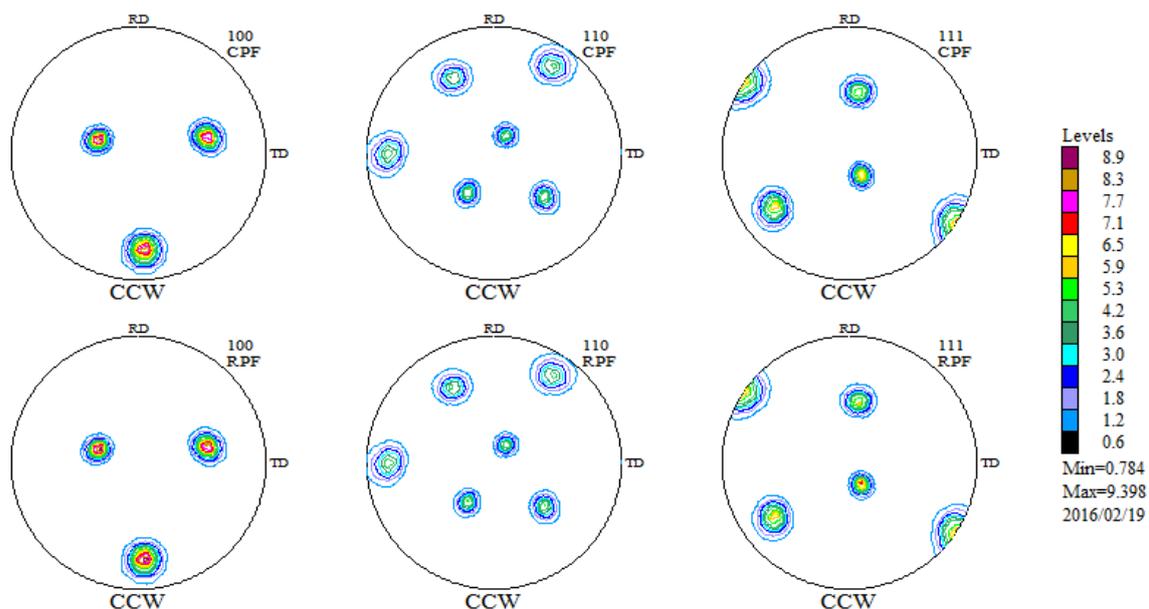
Step 5.00 $\varrho=$ 18.79 $\Phi=$ 36.70 $\varrho=$ 63.43 HKL (2 1 3) UVW (1 -5 1)



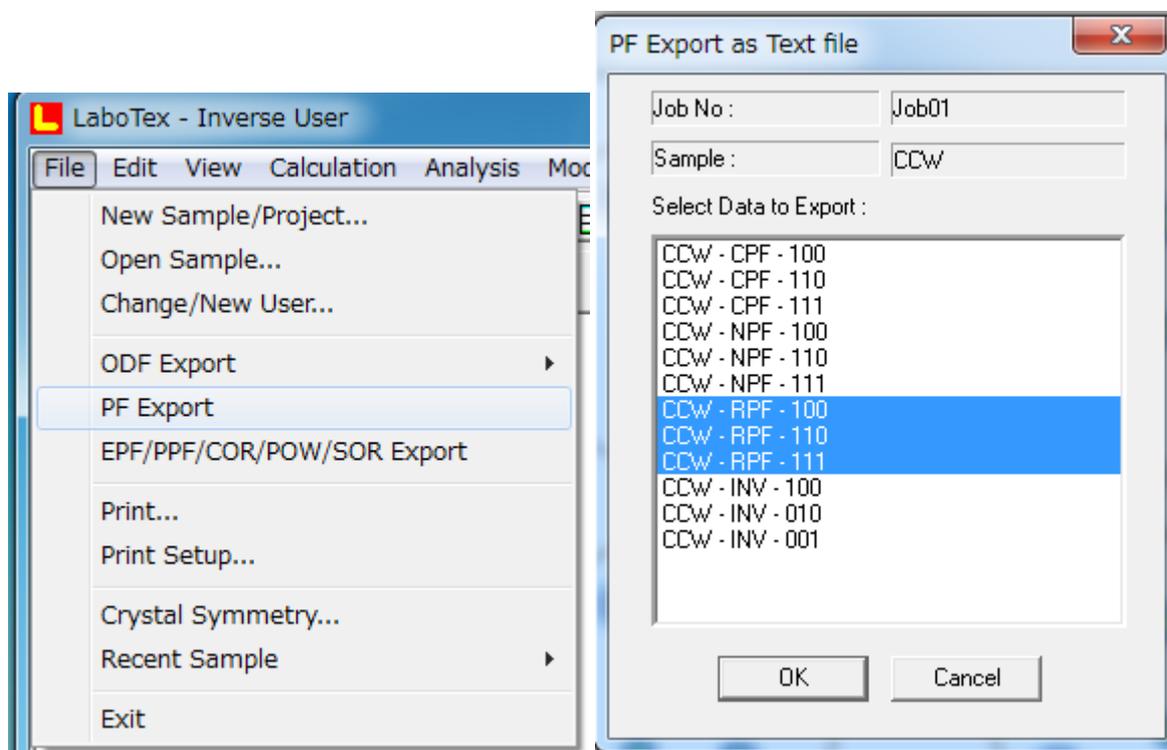
Step 5.00 $\varrho=$ 264.76 $\Phi=$ 74.76 $\varrho=$ 60.00 HKL (3 2 1) UVW (1 1 -5)



再計算極点図 (下段)



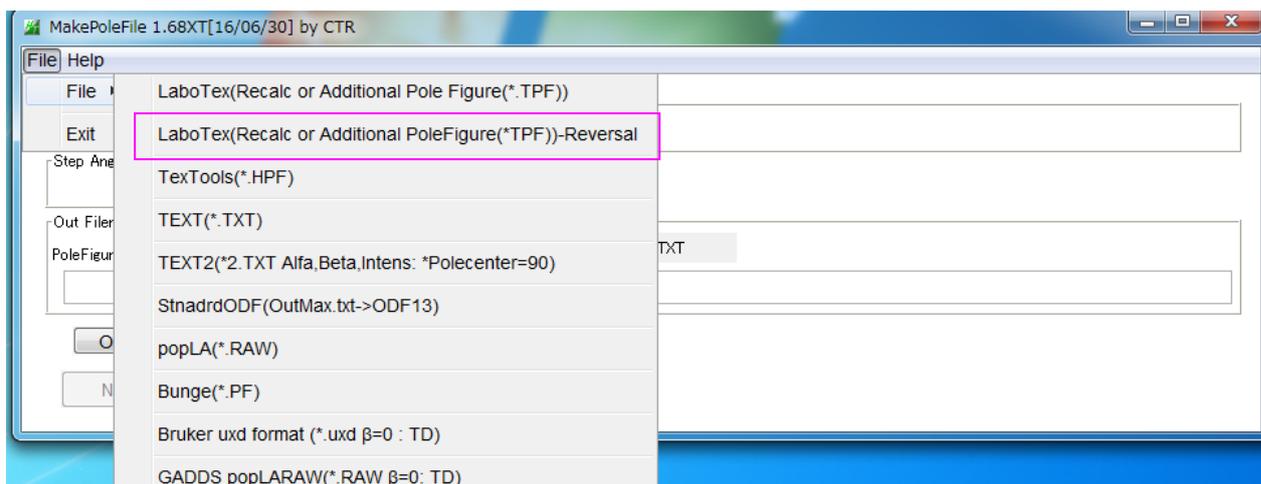
再計算極点図をE x p o r tして、測定データと比較する場合



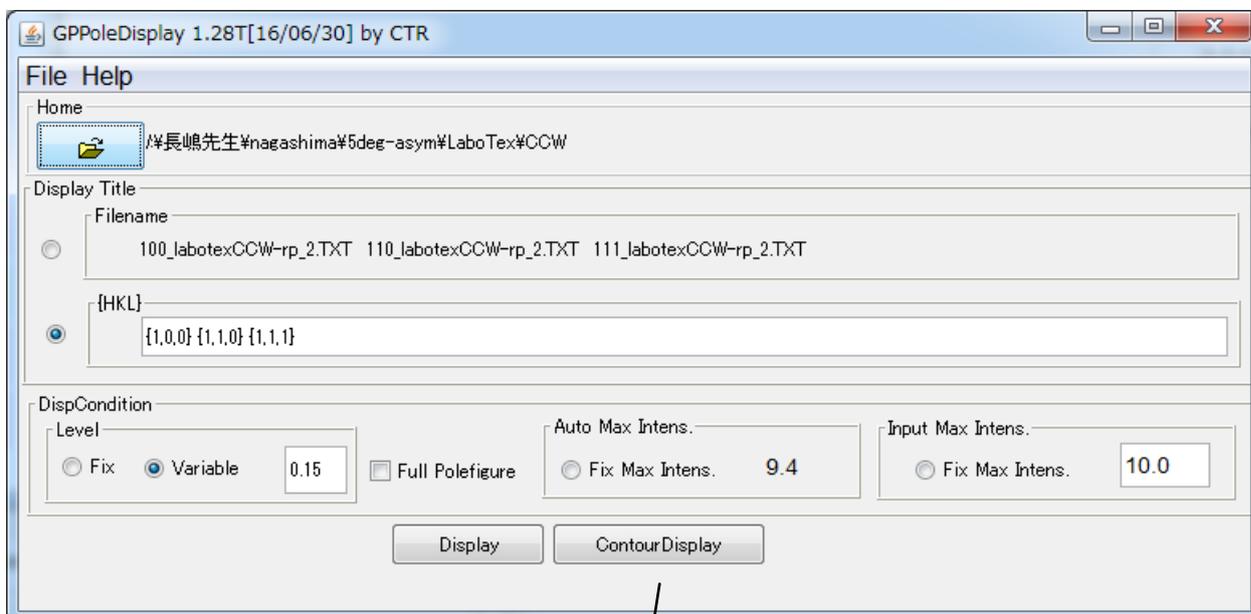
再計算した極点図を選択してファイルを作成する。

ODFPoleFigure2あるいはODFPoleFigure1。5ソフトウェアのToolKit->ODFAfter->MakePoleFileでTXT2ファイルを作成しGPPoleDisplayソフトウェアで表示できます。

MakePoleFileでLaboTexをReversalモードでTXT2変換



GPPoleDisplayでTXT2を表示



測定データと同一の極点図が得られます。

