

C u b e , C o p p e r , S 方位を 3 3 % 含む極点図、逆極点図、ODF 図

2 0 1 6 年 1 1 月 2 2 日

HelperTex Office

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

概要

「極点図からODF解析を行うと結晶方位 $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ の定量が出来る」と言われていますが本当でしょうか？

実はODF図から得られる結晶方位密度は、結晶方位によって係数をつけて論じなければなりません。この事に関する資料は以下に表記されています。

Determination of Volume Fractions of Texture Components with Standard Distributions in Euler Space

JAE-HYUNG CHO, A.D. ROLLETT, and K.H. OH

METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A

VOLUME 35A, MARCH 2004—1075

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)
	$\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$	$\{\alpha, \beta, \gamma\}$		
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, $\{001\} \langle 100 \rangle$	$\{\varphi_1 + \varphi_2 = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\Phi = 0$ deg}	$\{\alpha + \gamma = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated cube, $\{001\} \langle 110 \rangle$	$\{\varphi_1 + \varphi_2 = 45$ 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

1078—VOLUME 35A, MARCH 2004

METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A

結晶方位によって、ODFの最大値（注意1）が、Cube, Copper, Sは 4 : 2 : 1である。

（注意1）：Euler角度の広がり3方向（ φ_1 、 Φ 、 φ_2 ）に同等の場合です

このことから、極点図、ODF図、逆極点図は結晶方位によって、この係数を付けて考えなければなりません。結晶方位は $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ から計算されるEuler角度位置に対し非対称に広がりを持って存在します。

この非対称性と係数をもって、結晶方位に定量を行うのがVolume Fractionです。

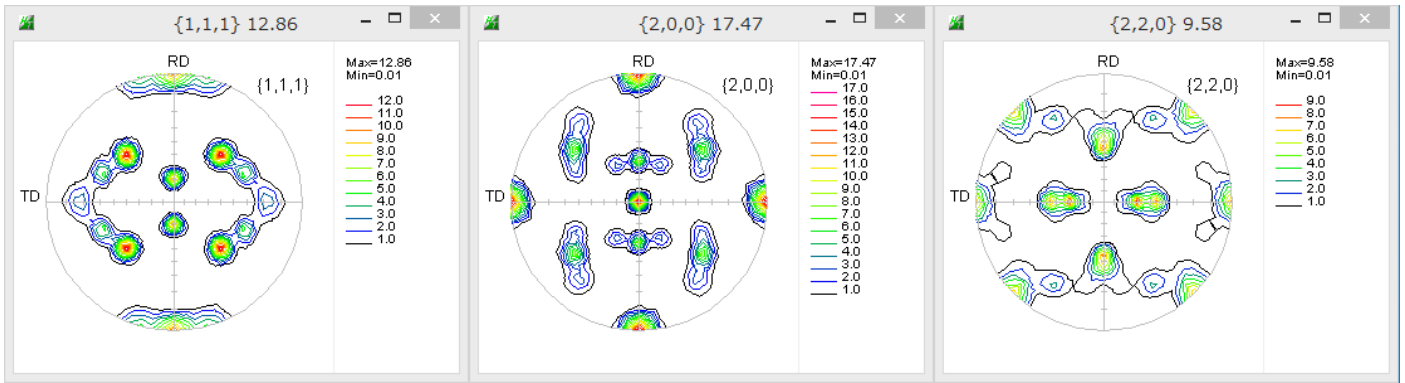
以下に

Volume Fractionで

結晶方位の広がりをGauss関数の半価幅10degで、Cube, Copper, S共33%含む極点図を作成して、ODF図、再計算極点図、逆極点図を計算してみます。

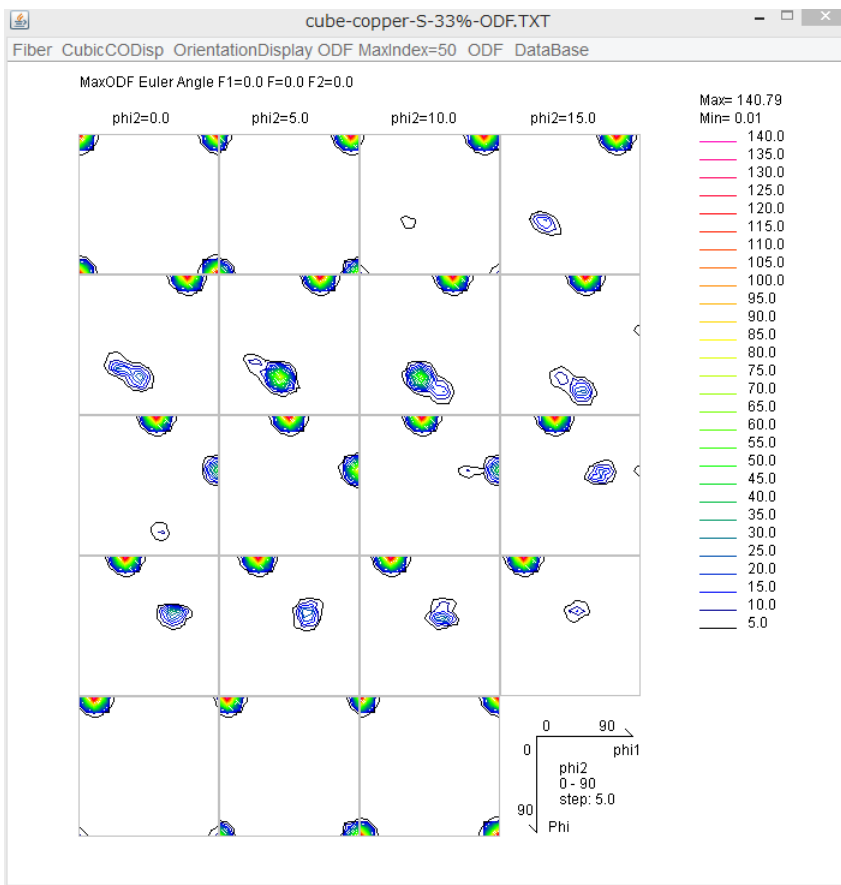
Cube, Copper, S方位を33%含む極点図

GPPoleDisplay で表示



実際に計算される方位密度

ODFDisplay で計算



ODF 図が5度間隔で解析が行われた結晶方位密度の最大値

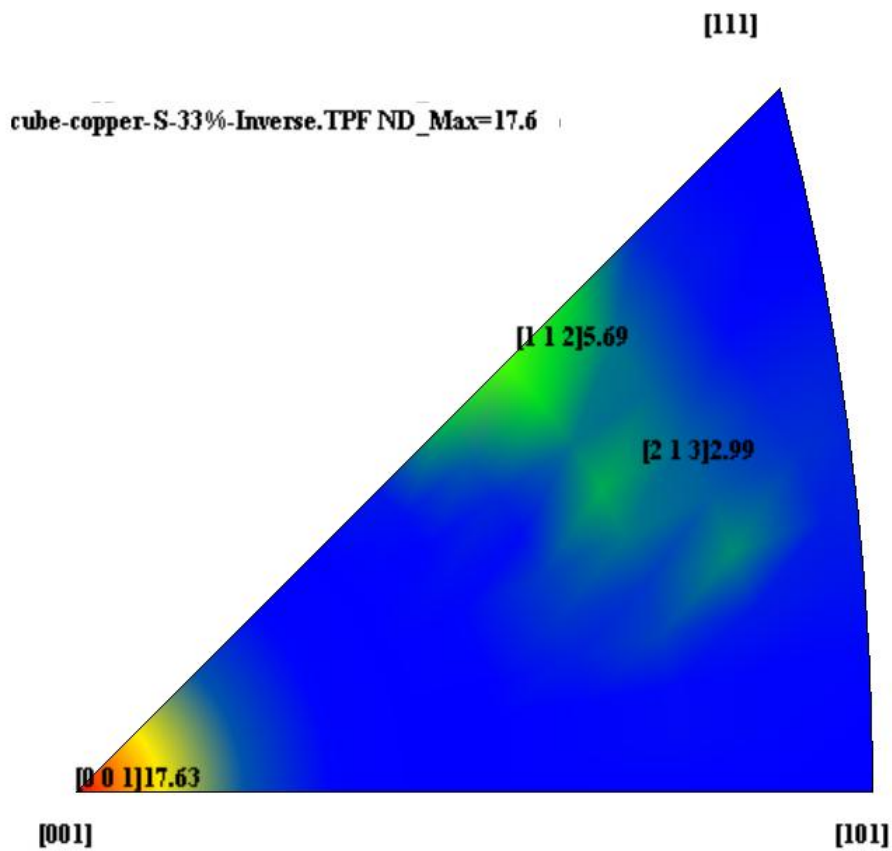
Orientation	ϕ_1	Φ	ϕ_2	ODF
{0 0 1}<-1 0 0> cube	0.0	0.0	0.0	140.8
{1 1 2}<-1 -1 1> copper	90.0	35.26	45.0	89.59
{1 3 2}<6 -4 3> S	27.03	57.69	18.43	27.07

同一の定量値でも最大方位密度は異なります。

逆極点図

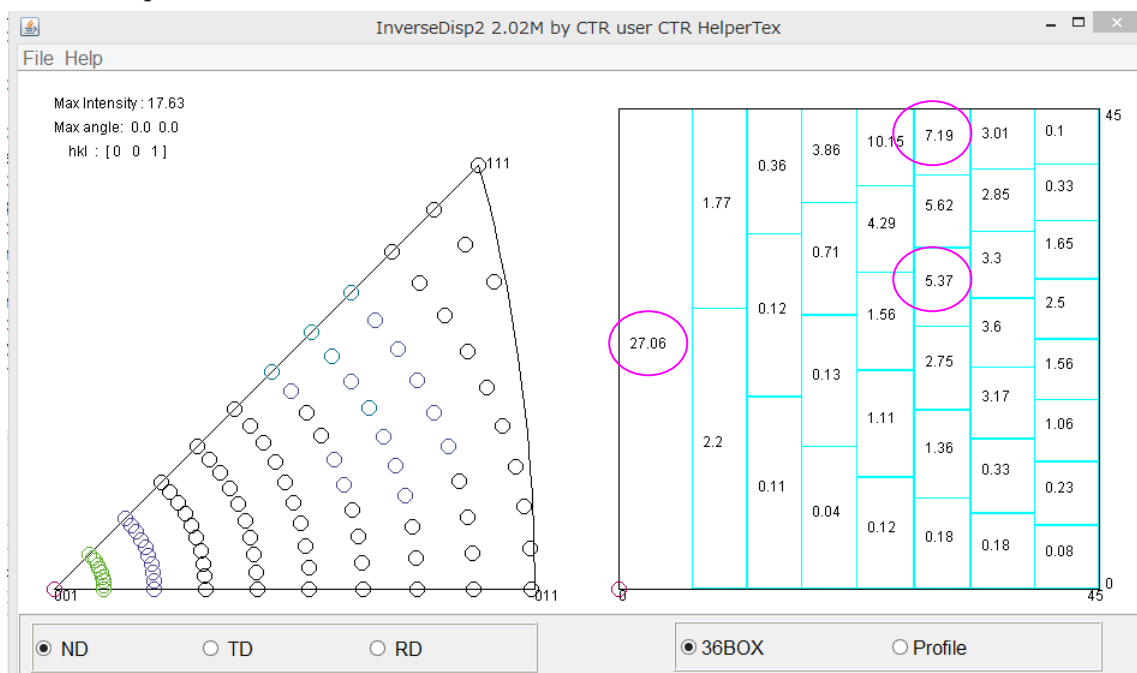
GPInverseDisplay で計算

```
[1 1 2] 35.792 45.0 5.69 35.792 45.0
[0 0 1] 0.0 0.0 17.63 0.0 0.0
[2 1 3] 37.467 30.0 2.99 37.467 30.0
```



Cube,Copper,S 17.63,5.69,2.99

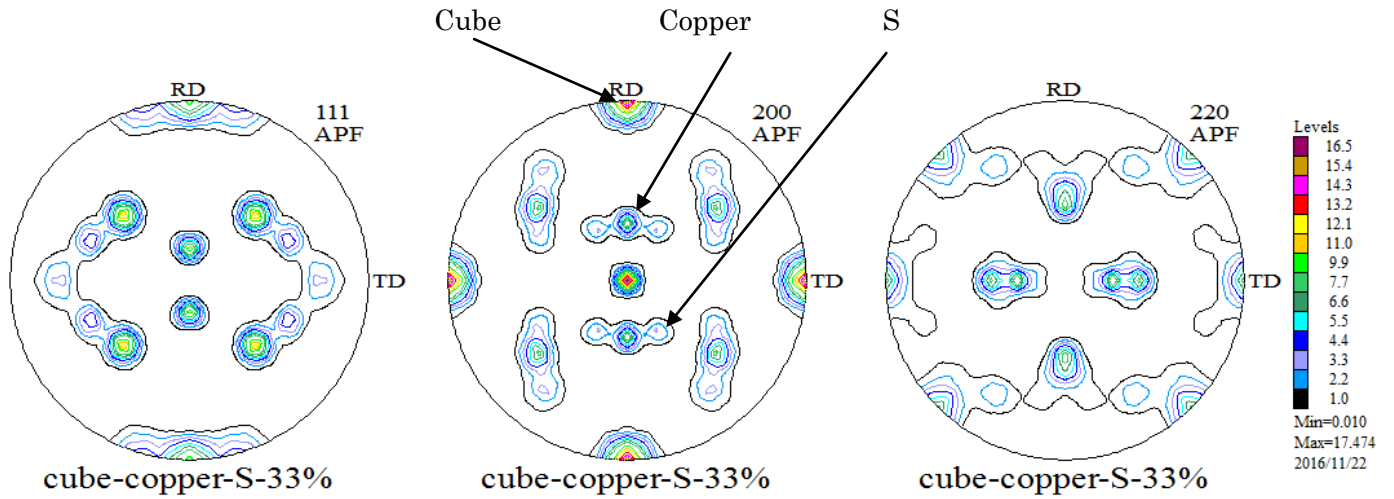
InverseDisp2 で計算



Cube,Copper,S 27.06,7.19,5.37

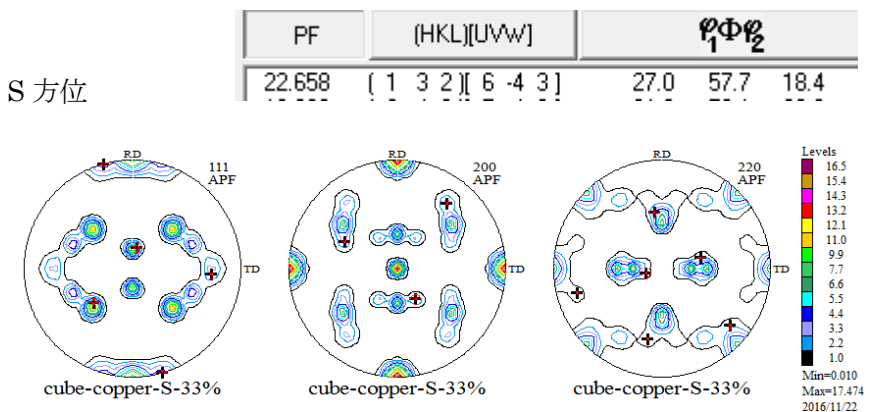
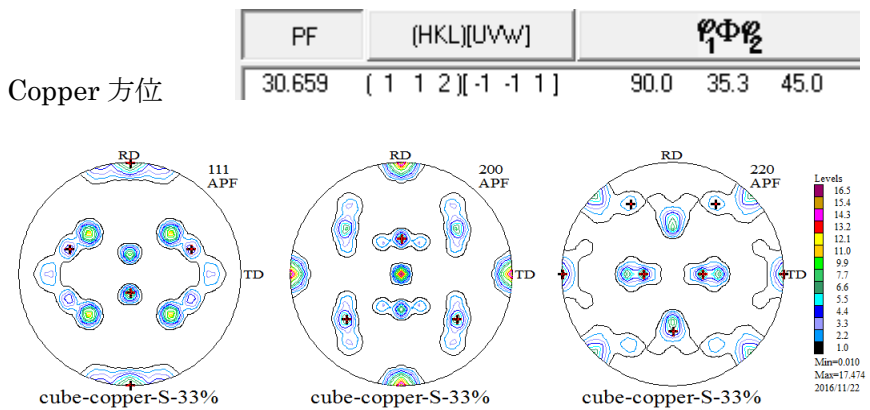
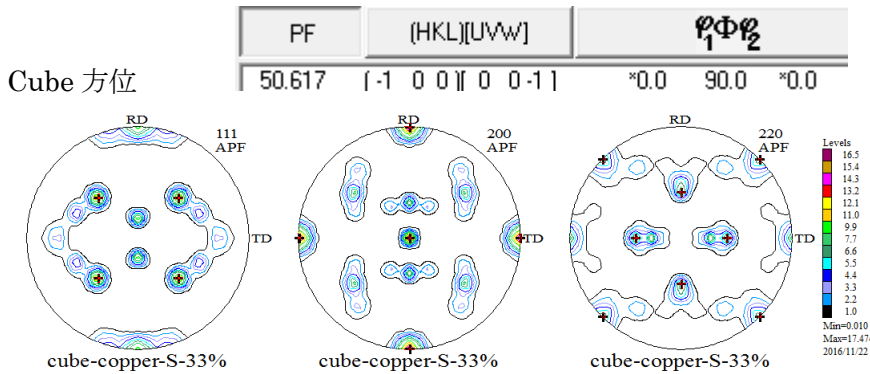
再計算極点図

LaboTex ソフトウェアで表示



Cube,Copper,S で極密度が異なります。

最大極密度は Cube,Copper,S で 50.6, 30.6, 22.6 と計算されます



VolumeFraction

LaboTex で計算

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:cube-copper-S-33% Job:1

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

Centre of Orientation (100.0%) Centre of Orientation (100.0%) Centre of Orientation (100.0%)

Misfit Good Backgr. Diff.

No	Texture Component	On	Distribution	FVHM ϕ_1	FVHM Φ	FVHM ϕ_2	Volume Fraction	Show Sym. Eq.
1	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	33	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
2	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	33	
3	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	12.0	10.4	12.1	33	
4	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	6	
5	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	6	
6	{ 2 3 1 } < -3 -4 6 > S-4	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	7	
7	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	7	
8	{ 0 1 6 } < 0 -6 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	7	
9	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	
10	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	

Max. Linearity Orientation Set: Set from Database (sort by) Save Current Set Background: 1

Calculation Mode: Automatic Manual
 Max. Iteration Number: 1,000 Max. Fit Error % (*1000): 100
 Iteration: 688 Fit Error% (*1000): 2590
 Fit Calculation Progress:

Change Initial Parameters Start Volume Fraction Calculation Exit Exit and Show