

アルミニウムの極点測定

R i g a k u-U l t i m a I Vで測定

C T Rパッケージ評価

S t a n d a r d O D F処理

2014年03月13日

HelperTex Office

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

目次

概要

測定

データ処理

d e f o c u s 測定

試料測定

逆極点図で配向度合いを比較

極点図測定ファイル

d e f o c u s 測定データ

d e f o c u s ファイル作成

d e f o c u s 曲線の確認

1 0 5 0 0 材の極点図

StandardODF 向けファイルを作成

S t a n d a r d O D F 解析

ODF 図の描画

再計算極点図の描画

逆極点図の描画

CTRパッケージソフトウェアのODFD i s p l a y ソフトウェアによる描画

3 面標示

1 面表示

方位解析

方位」 L i s t 表示

F i b e r 表示

CTRパッケージソフトウェアによる再計算極点図描画

CTRパッケージソフトウェアによる逆極点図描画

概要

材料の異方性評価として、極点測定が利用されている。本資料では測定、解析の概要を把握する事を目的に解説を行う。

測定

XRDによる測定では、通常、受光モノクロメータを用いないで測定が行われる。

極点測定では、回折線の正味積分強度を測定するため、回折ピーク周辺のバックグラウンド強度測定も行う。又、試料を煽って測定する光学系に起因する *d e f o c u s* も補正を行うため、無配向試料による *d e f o c u s* 測定も行われる。

データ処理

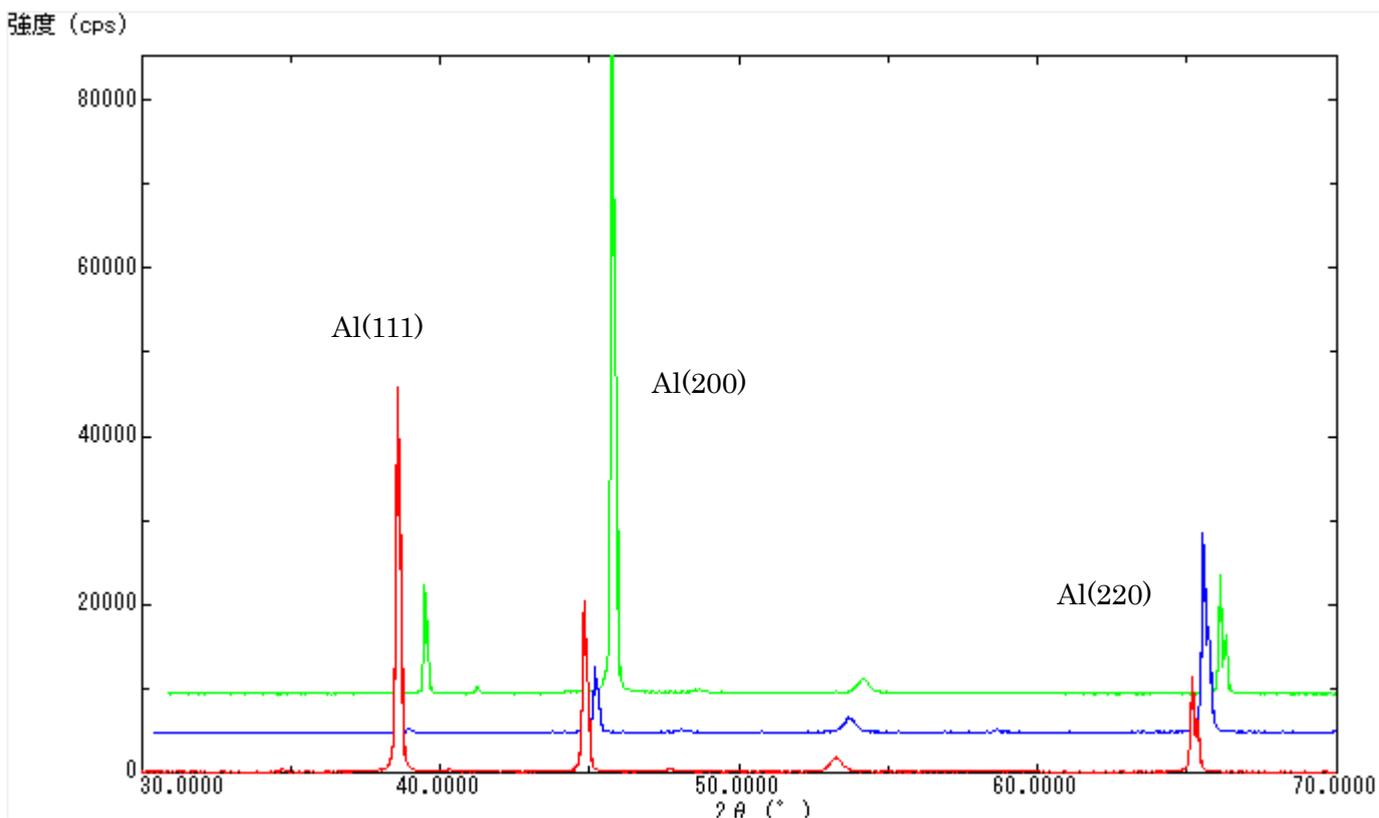
回折積分強度からバックグラウンド強度を差し引き、正味積分強度を求め、光学系補正の *d e f o c u s* 補正を行う。
積分強度の平均値が 1. 0 になるような規格化を行う。

d e f o c u s 測定

被検試料と同一の材料で無配向試料を測定し、バックグラウンドを削除して、 β 方向の平均値を α 方向にプロットした曲線を得る。

本来、無配向試料であれば、 β 方向は一定であるので、 β 方向 360 度の範囲を必要としない。

試料測定



赤 : random 試料、緑は H 材料、青は O 材料

r a n d o m 試料に比べ、H材は、{ 2 0 0 }、O材は { 2 2 0 } に配向している事が分かる。

逆極点図で配向度合いを比較

連続測定データをピーク毎の分割データとしてピーク強度、積分強度を算出して random 試料との比率を計算する。連続データの分割化は、ProfiletoDivisionProfile ソフトウェアで行い、分割化したデータの Random 試料との比較を InverseAll ソフトウェアで行う。

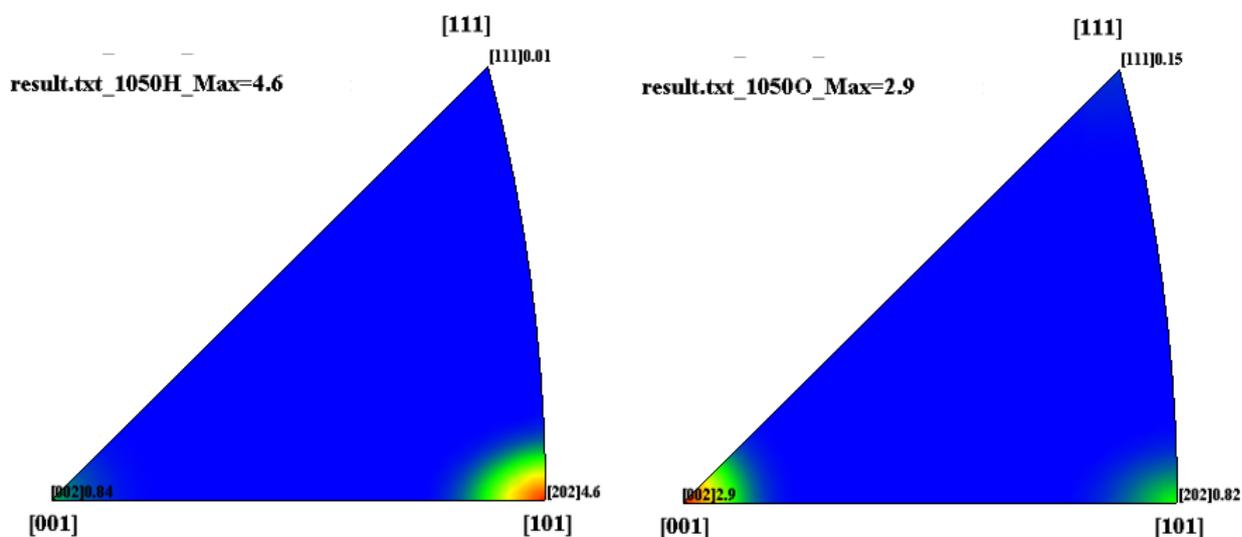
Random 材料との比較 材料はアルミニウム random 材料指定

比較する材料を指定 計算

計算結果を表示

	[111]	[200]	[220]
1050H	0.013	0.837	4.597
1050O	0.15	2.903	0.815

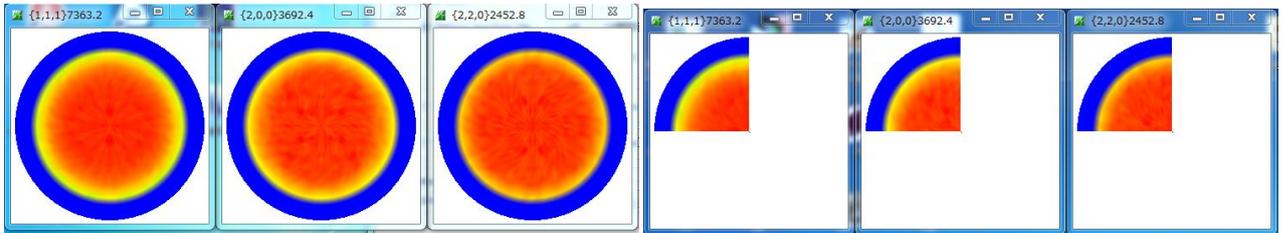
ステレオ三角形で表示



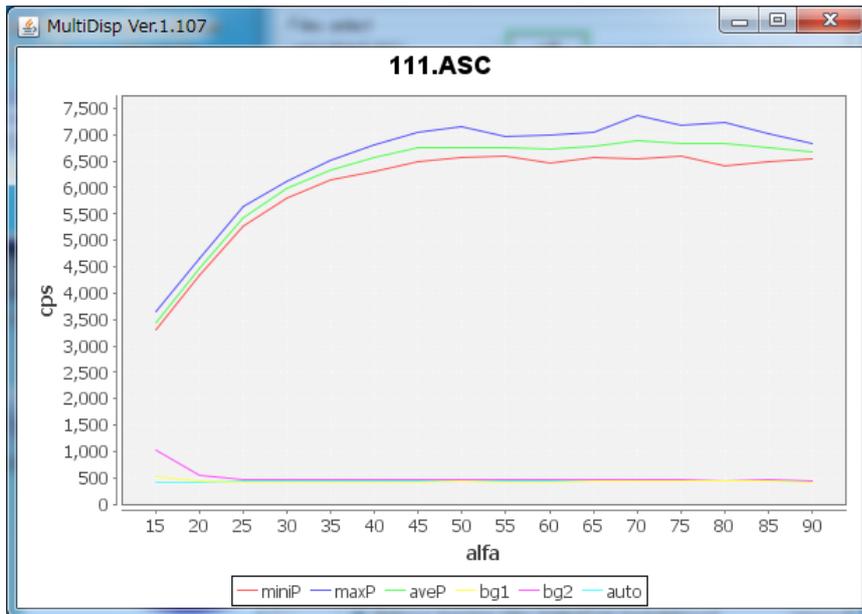
極点図測定ファイル

ファイル名の先頭は、指数を指定
ホルダー、ファイル名にスペースは使用しない。

defocus 測定データ

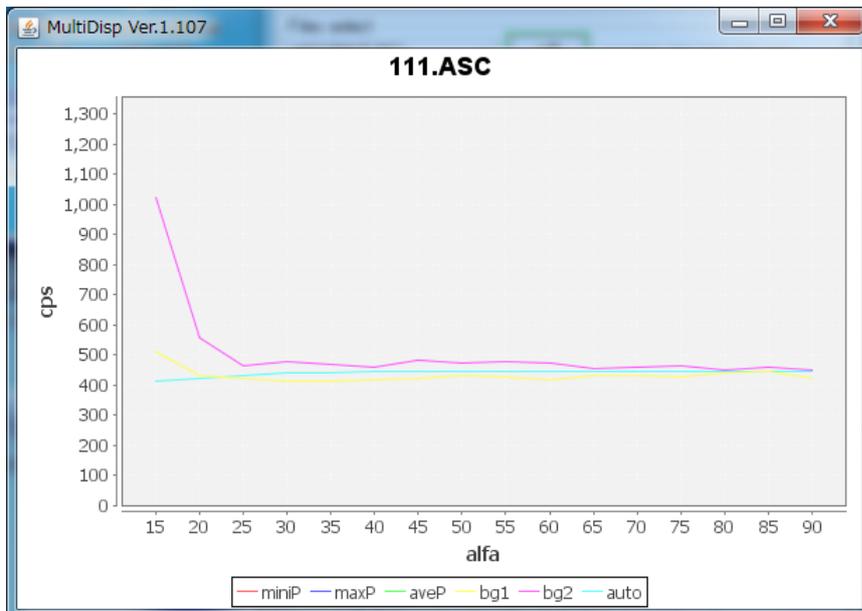


Schulz の反射法の場合、 α 角度は 15 度から 90 度、 β は 0 度から 360 度（0 度から 90 度でも可）測定データ評価として、バックグラウンド測定が適正に測定されているか評価する。



β 方向の平均値を α 方向にプロットしています。

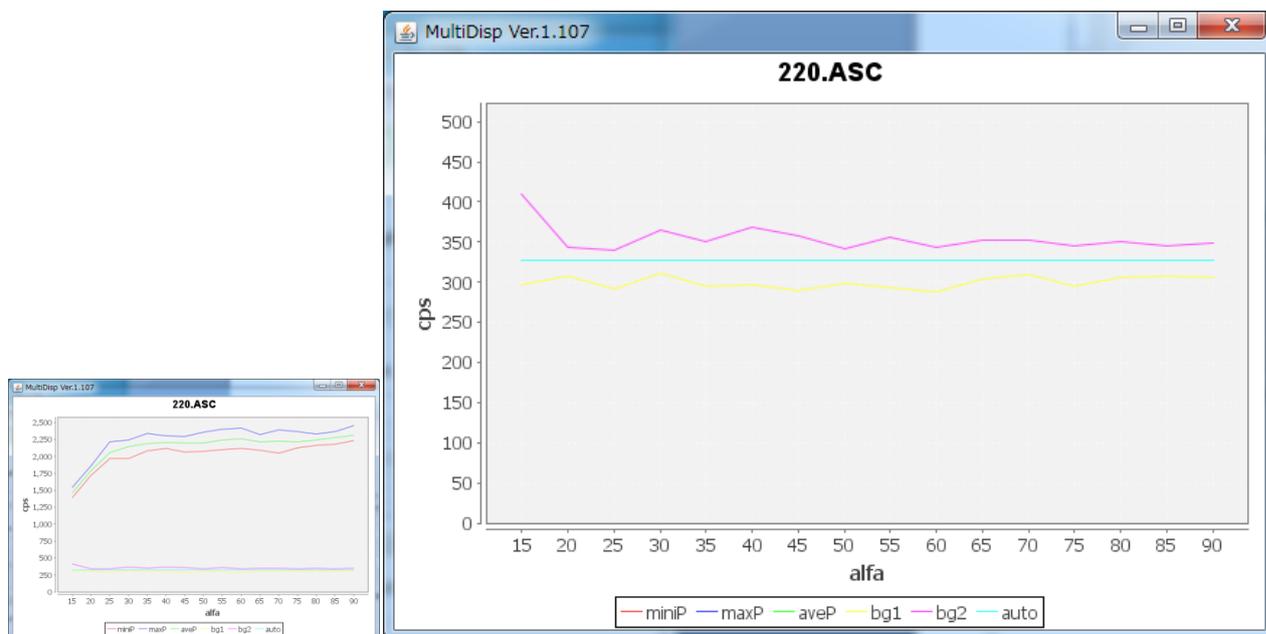
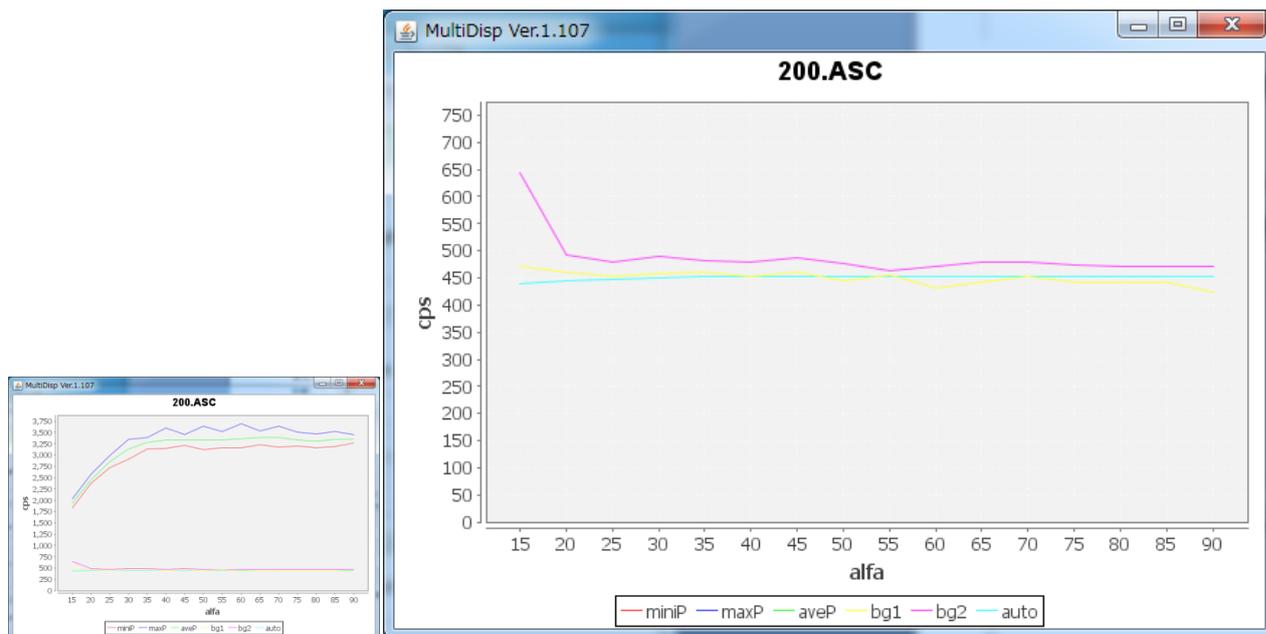
α 毎に、 β 方向の最大値が青、平均値が緑、最小値が赤、BG1 が紫、BG2 が黄色、水色は BG 最適値



受光スリット 7 mm でも試料を最大に煽った $\alpha=15$ 度では、ピークが広がりバックグラウンドに影響している事が分かります。

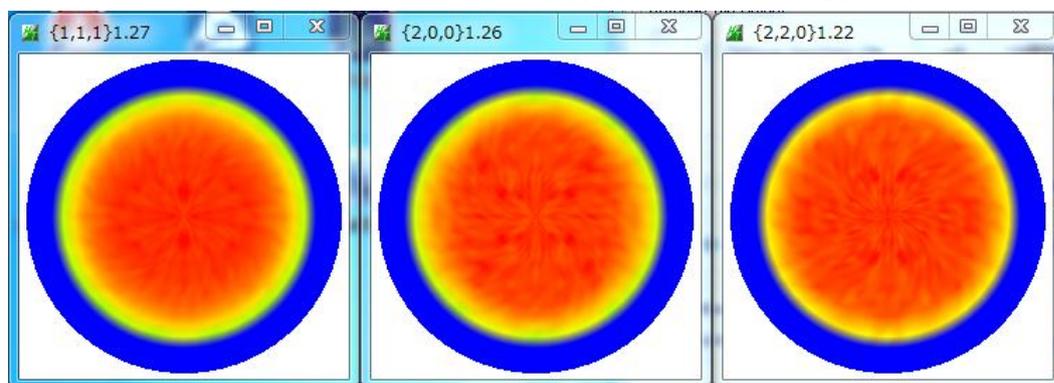
バックランド除去は、水色のバックグラウンド最適値で削除される。

同じように {200}、{220} も同様な処理を行う。



バックグラウンド測定は、ピーク角度の ± 3 度の測定を行う。

又、バックグラウンドの変動を抑える為に、積分測定時間はピーク測定時間より長く測定する。

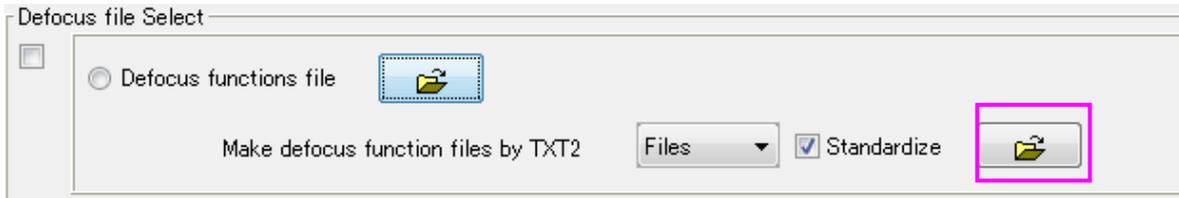


バックグラウンドを削除した極点図 (TXT2)

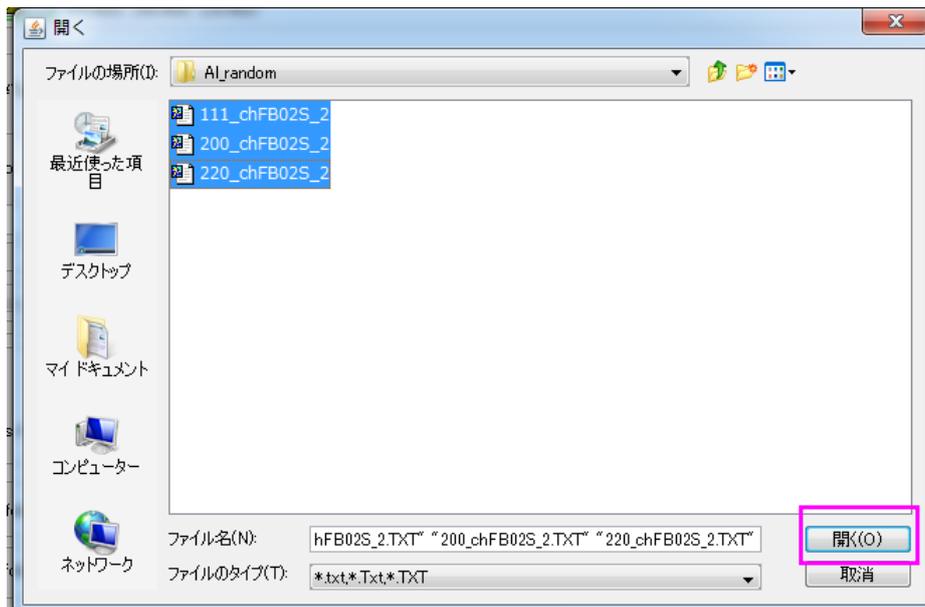
	111_chFB02S_2	2014/03/13 8:23	テキスト文書	22 KB
	200_chFB02S_2	2014/03/13 8:23	テキスト文書	22 KB
	220_chFB02S_2	2014/03/13 8:23	テキスト文書	22 KB

バックグラウンドを削除して、強度の規格化を行ったデータファイル(TXT2)

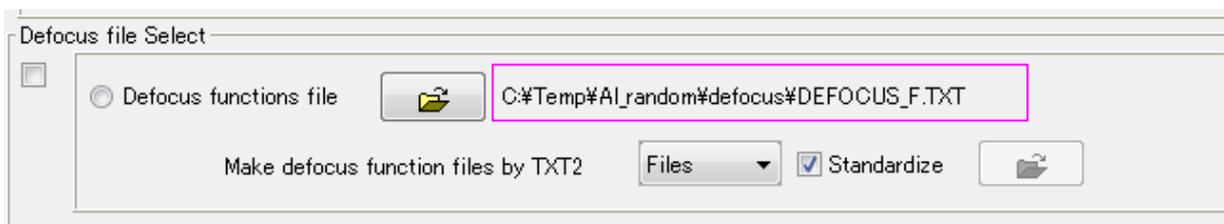
defocusファイル作成



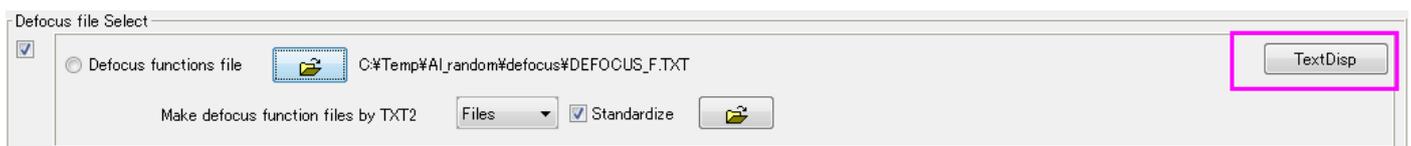
上記 defocus データ (TXT2) を登録する。



同時に複数のファイルを選択



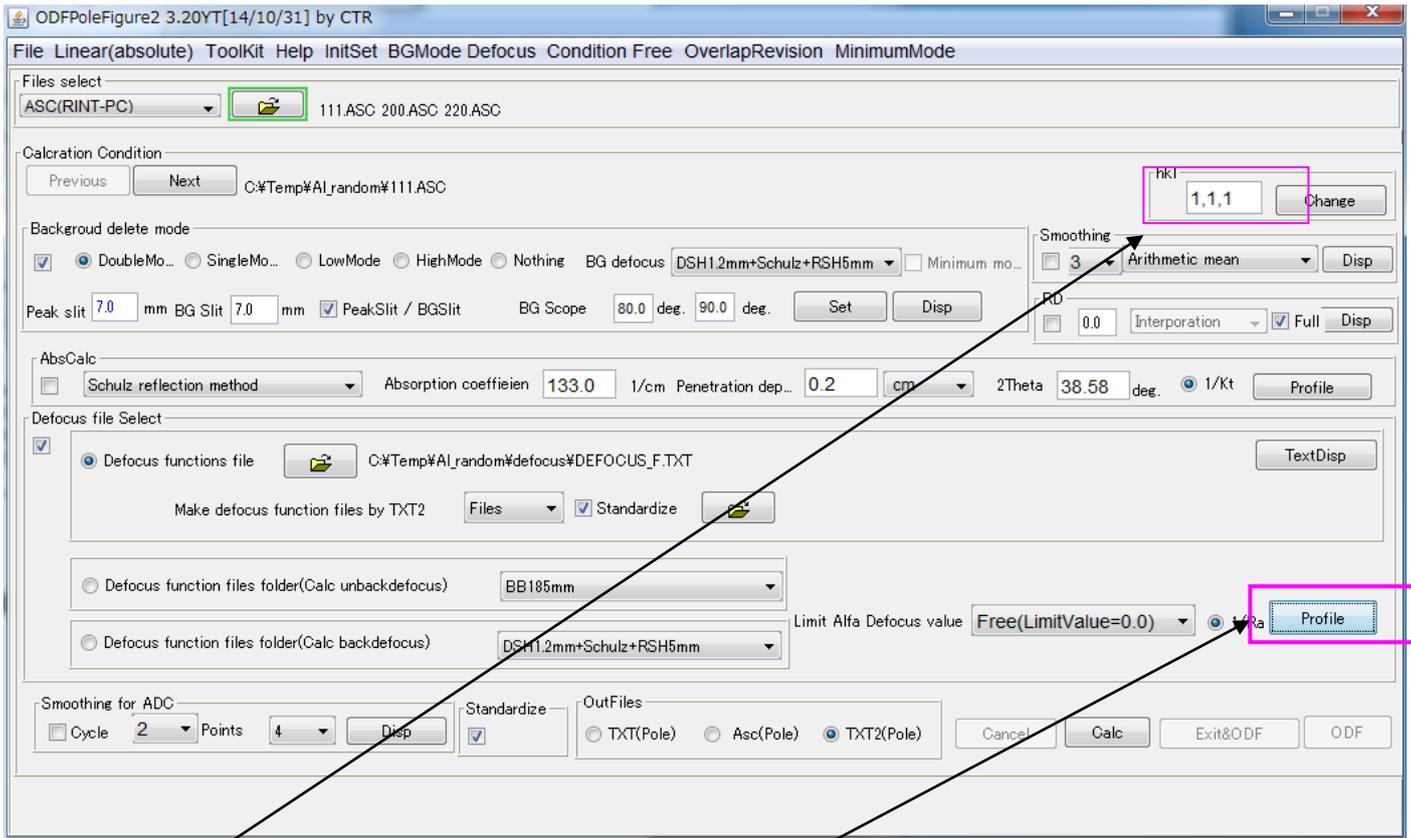
複数の TXT2 から1つの defocus 近似曲線ファイルふぁ作成される。



```
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 14/03/13 3.10 for DefocusCalc,
111_chFB02S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,1.0,0.9964352435013348,0.007548925162447637,-5.991665369836513E-4,1.8744375
200_chFB02S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,1.0,0.998091162447476,-1.2882822679029194E-4,7.333960461265471E-5,-4.6622003
220_chFB02S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,1.0,1.0043298675817023,-0.00926070440029016,7.268435158341374E-4,-2.66770340
```

ファイルの先頭に指数が配置されている。

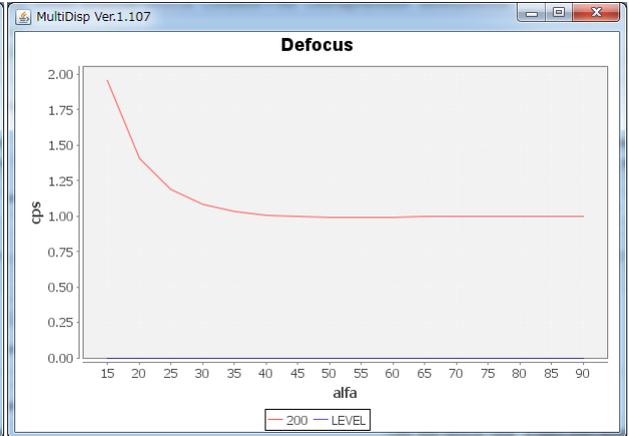
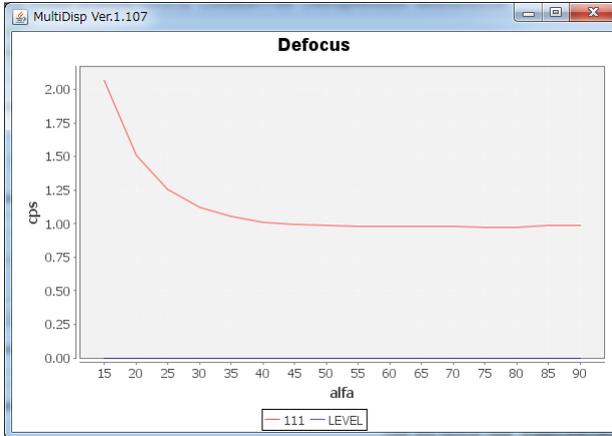
defocus 曲線の確認



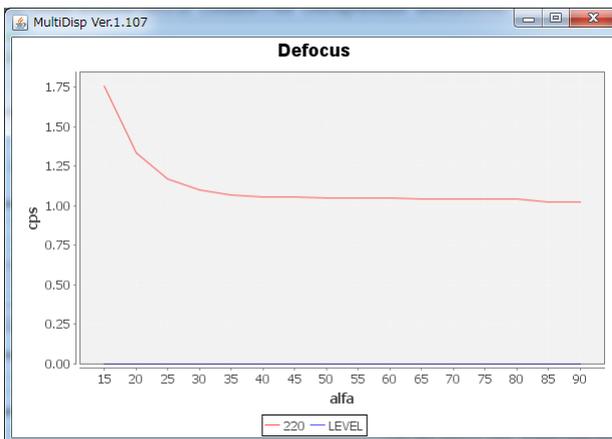
測定時指定した指数と一致する DEFOCUS_F.TXT の曲線を表示する

{111}

{200}

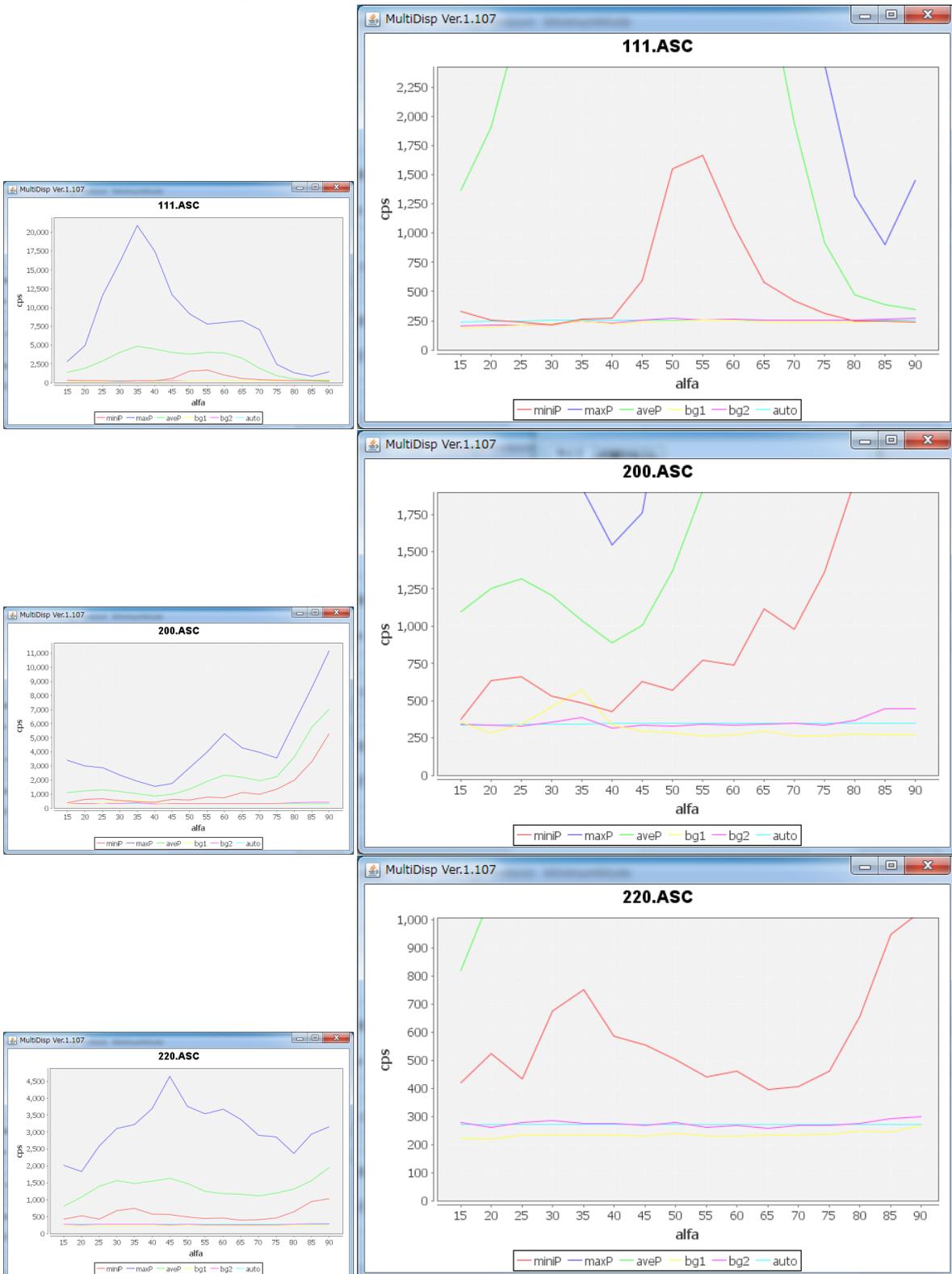
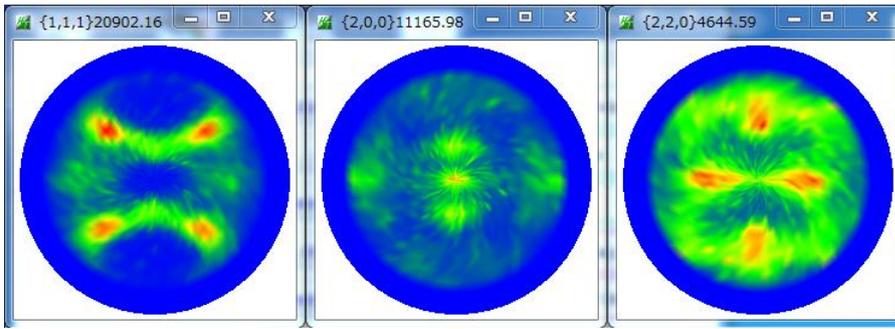


{220}

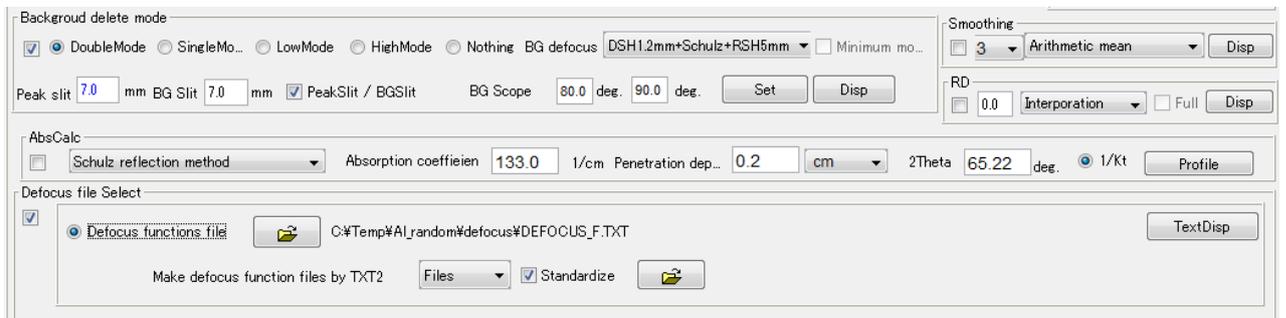


実際に測定されたプロファイルの逆数で補正

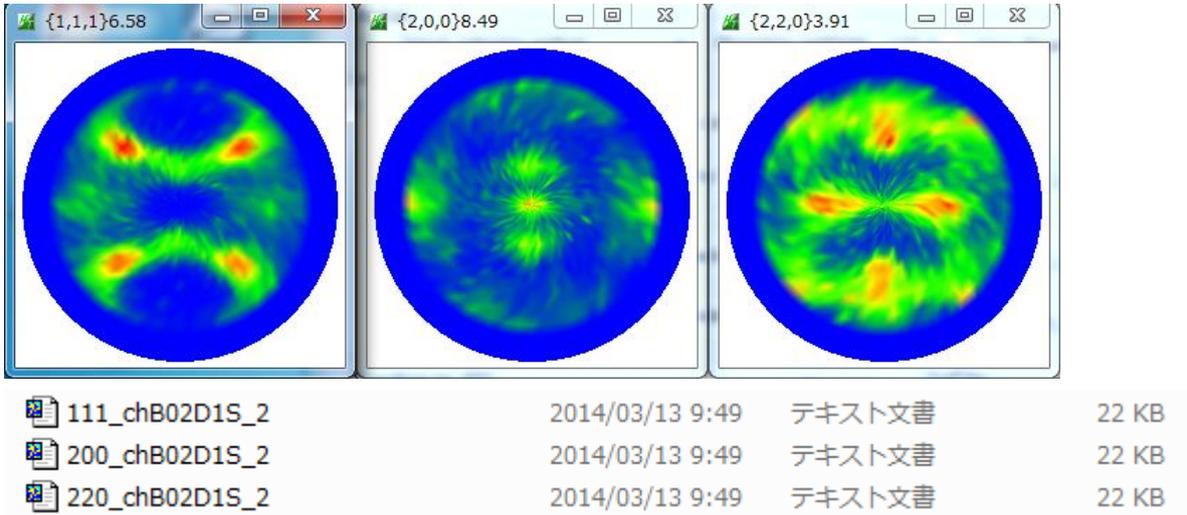
10500材の極点図



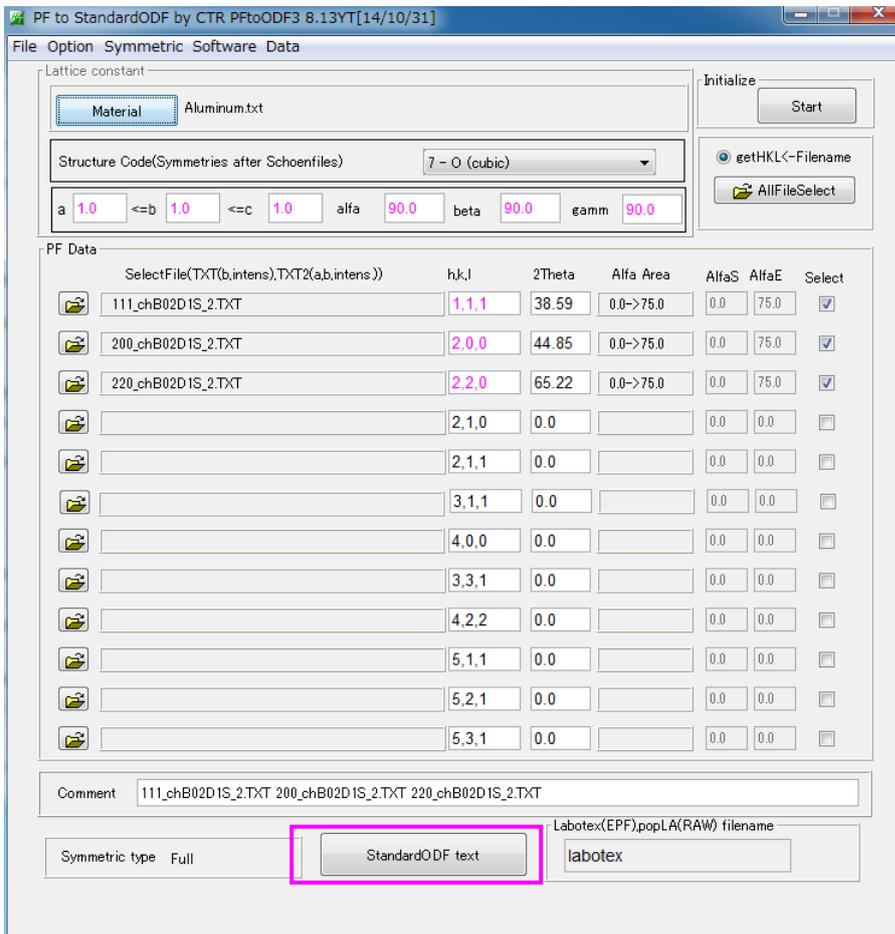
バックグラウンド測定は適正に行われている事が確認出来ます。



バックグラウンド削除と defocus 補正を行う。



StandardODF 向けファイルを作成



測定データホルダにODF向けホルダーを作成し、ホルダーにODF向けファイルを作成

StandardODF	2014/03/13 9:53	ファイルフォル...
LaboTex	2014/03/13 9:54	ファイルフォル...

10500 ▸ StandardODF			
フォルダー			
名前	更新日時	種類	サイズ
111_chB02D1S_2StdODF	2014/03/13 9:53	テキスト文書	9 KB
200_chB02D1S_2StdODF	2014/03/13 9:53	テキスト文書	9 KB
220_chB02D1S_2StdODF	2014/03/13 9:53	テキスト文書	9 KB

StandardODF解析

ODF Calculation
☰ ☲ ☳

極点図データ

面指数	重み	ファイル名(フルパス)	
<input checked="" type="checkbox"/> (100)	1	F:\Temp\10500\StandardODF\200_chB	参照
<input checked="" type="checkbox"/> (110)	1	F:\Temp\10500\StandardODF\220_chB	参照
<input checked="" type="checkbox"/> (111)	1	F:\Temp\10500\StandardODF\111_chB	参照
<input type="checkbox"/> (210)	1		参照
<input type="checkbox"/> (211)	1		参照
<input type="checkbox"/> (221)	1		参照
<input type="checkbox"/> (310)	1		参照
<input type="checkbox"/> (311)	1		参照
<input type="checkbox"/> (321)	1		参照
<input type="checkbox"/> (331)	1		参照
<input type="checkbox"/> (411)	1		参照
<input type="checkbox"/> (511)	1		参照

α max = 75 Δα = 5 Δβ = 5

β角のタイプ β = 0°, 5°, 10°, ……., 350°, 355°
 β = 2.5°, 7.5°, 12.5°, ……., 357.5°

Standard ODF

for Windows XP/Me/2000/98SE/98/NT4.0/95 Ver.2.4 [解析法について](#)

結晶方位分布関数

展開次数

ゼロ密度領域のしきい値

表示断面 Phi1断面
 Phi2断面

再計算極点図

1 2

3 4

1/4極点図 係数 偶数項 奇数項

0% 100%

実行(G)

終了(E)

集合組織変換

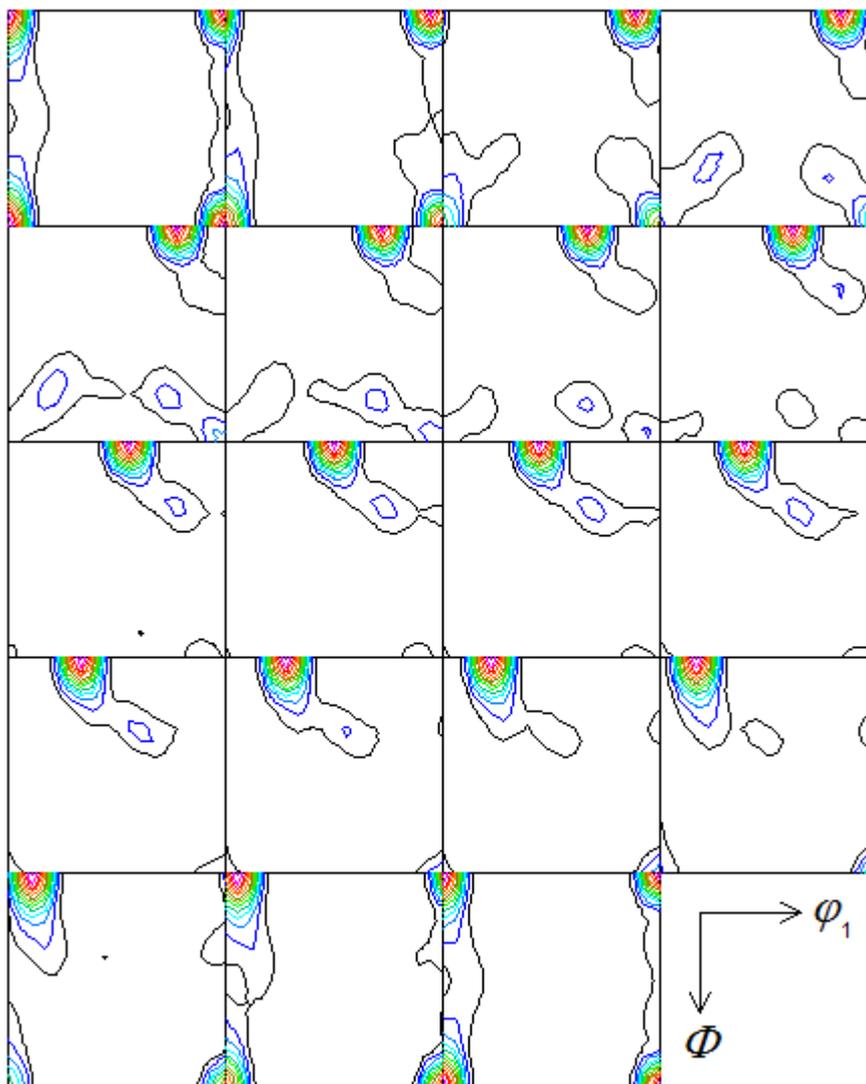
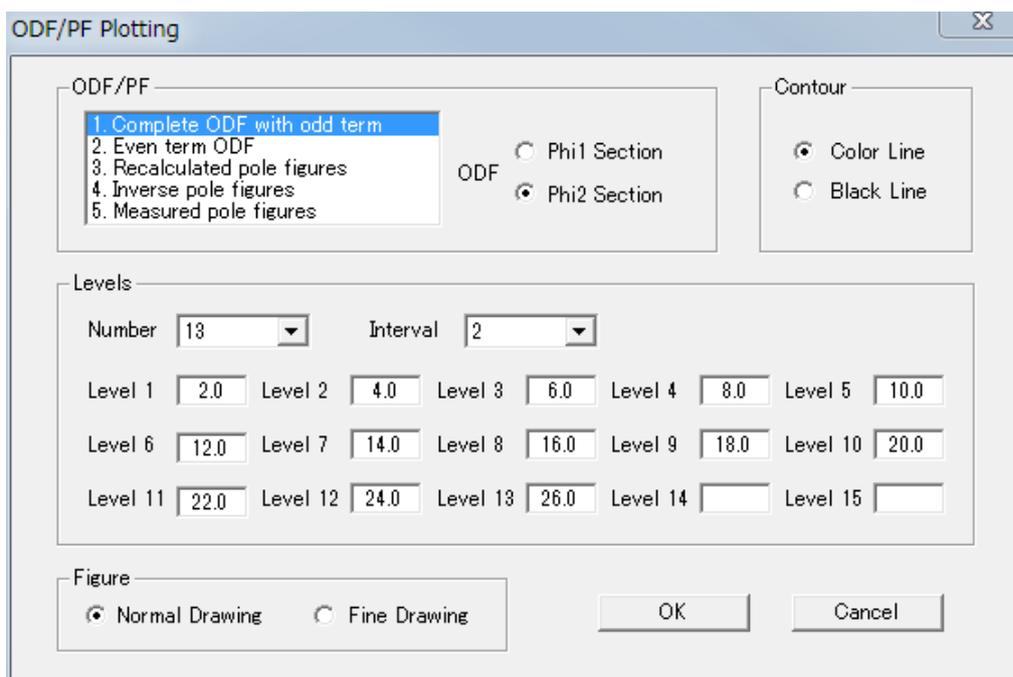
しない RD極点図 → ND-ODF TD極点図 → ND-ODF

計算結果

完全ODFの最大強度: 26.62
偶数項ODFの最大強度: 21.82
再計算極点図の最大強度: 9.72
逆極点図の最大強度: 9.72

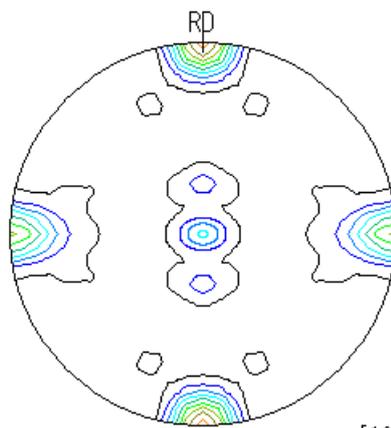
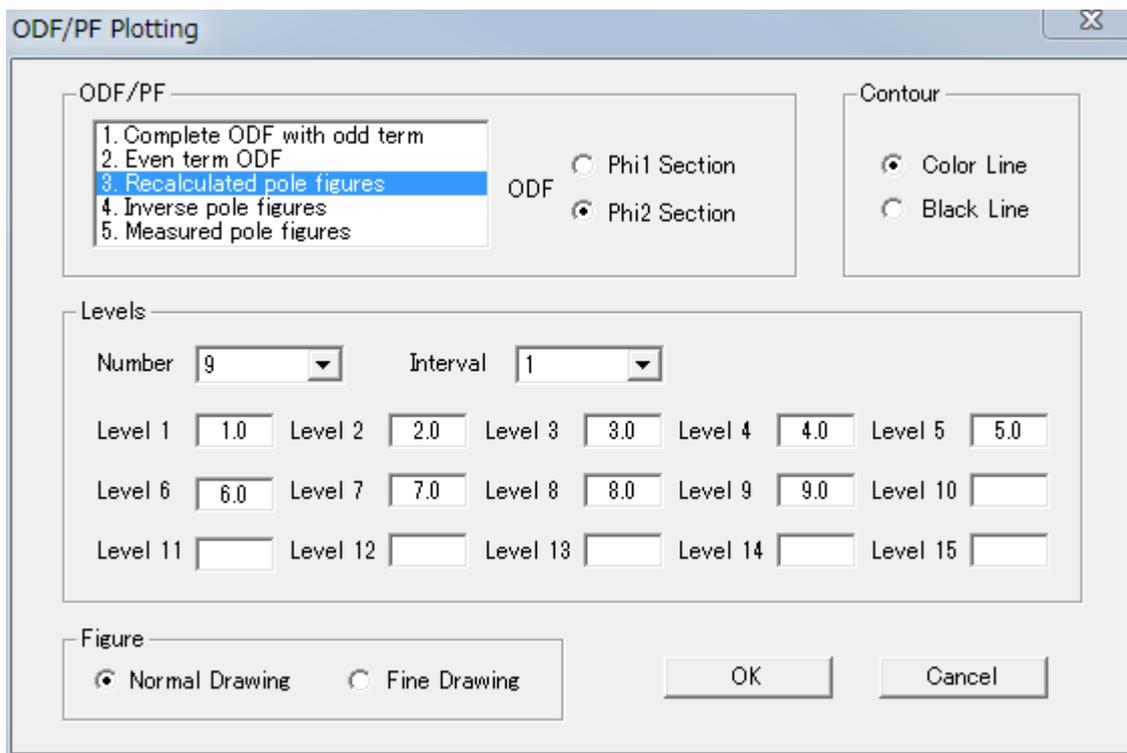
OK

ODF図の描画

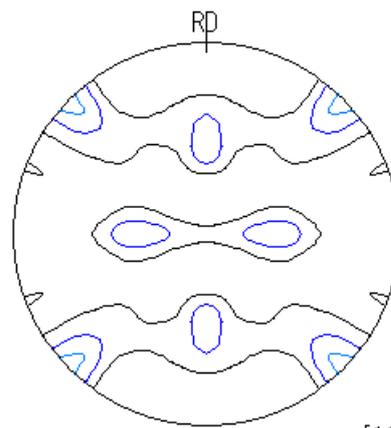


Contour Levels: 2.0 4.0 6.0 8.0 10.0 12.0 14.0 16.0 18.0 20.0 22.0 24.0 26.0

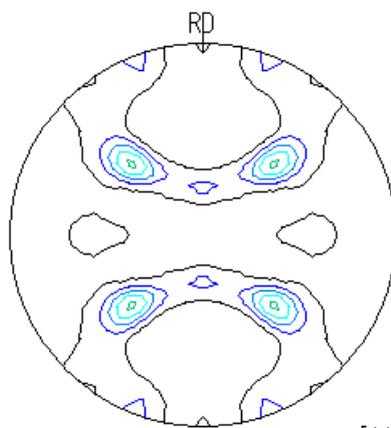
再計算極点図の描画



[100]



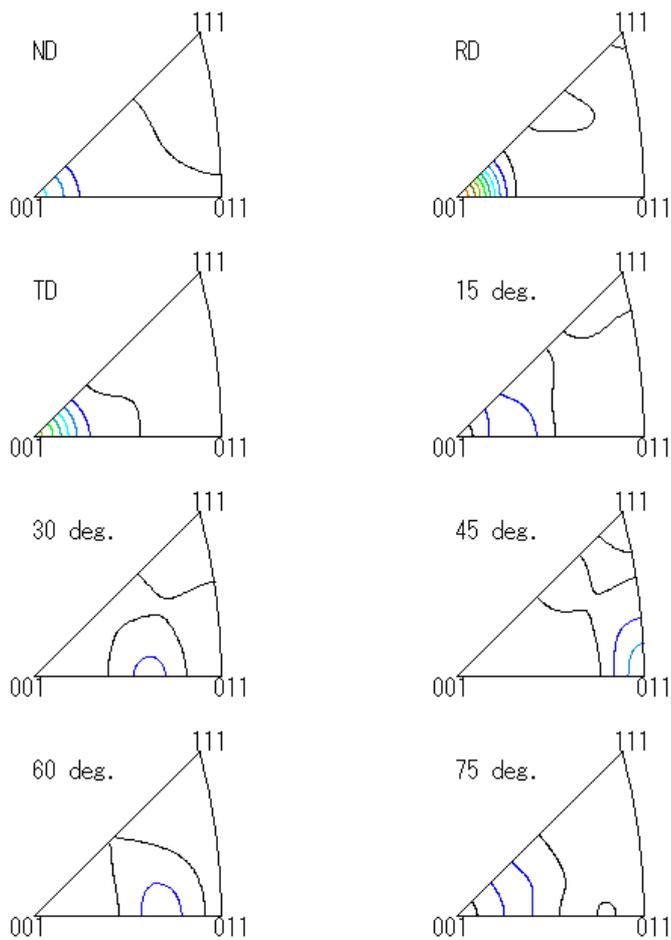
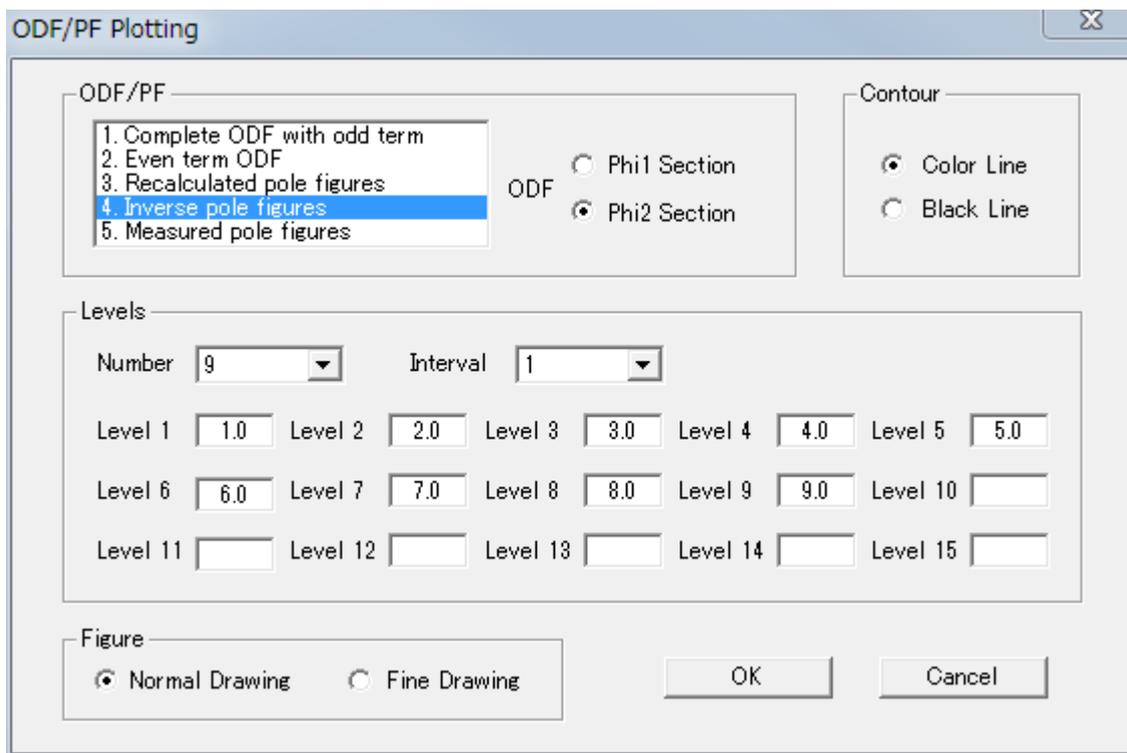
[110]



[111]

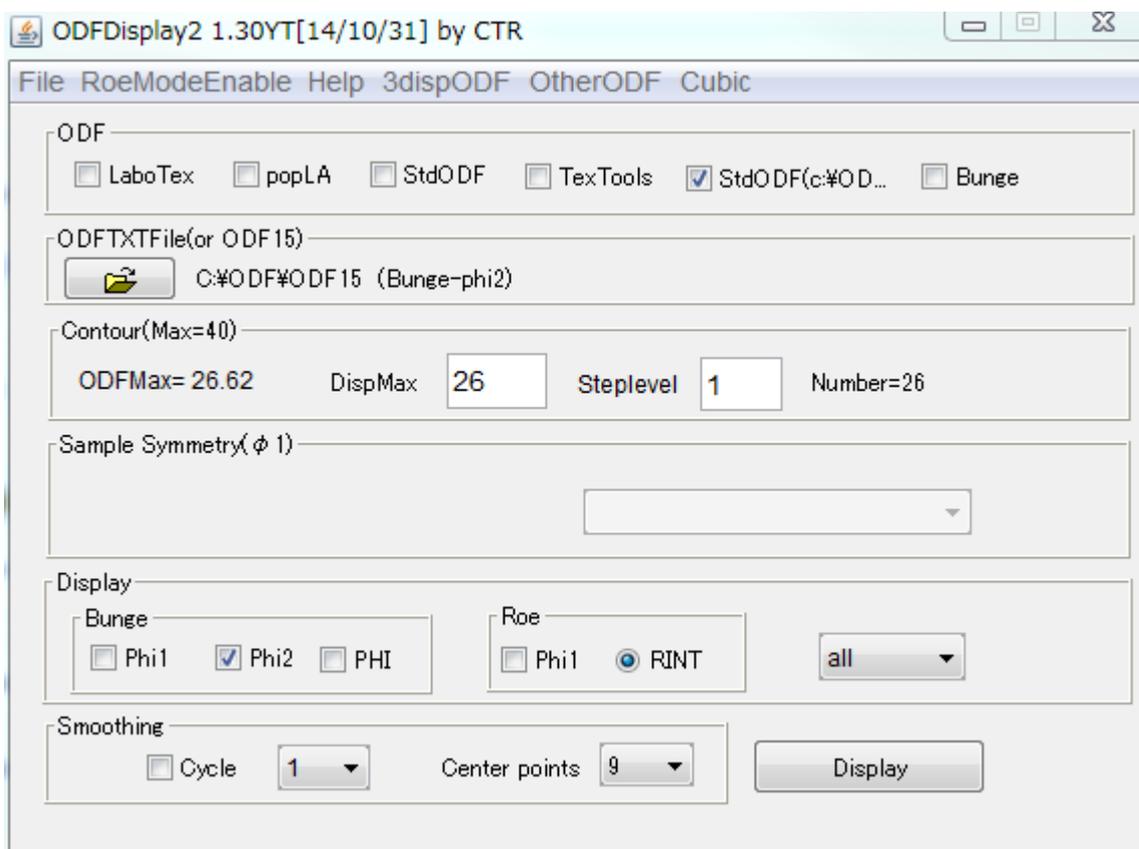
Contour Levels 02.03.04.05.06.07.08.09.0

逆極点図の描画

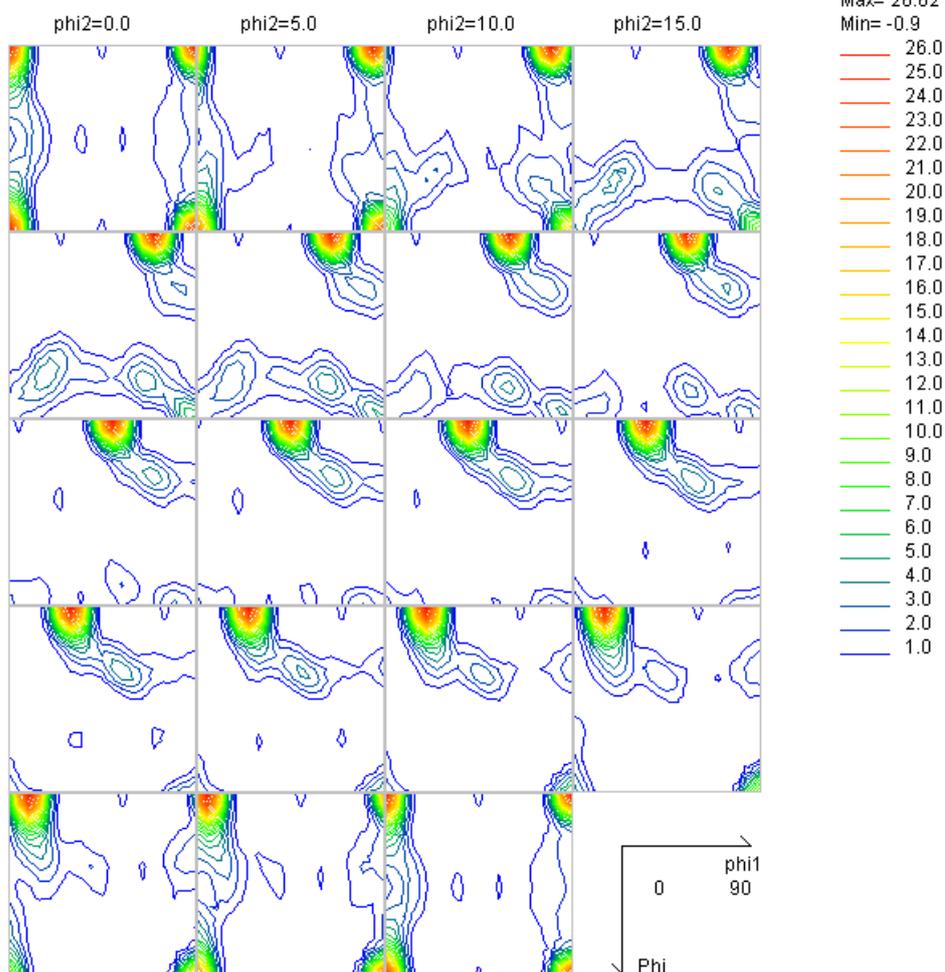


Contour Levels 02.03.04.05.06.07.08.09.0

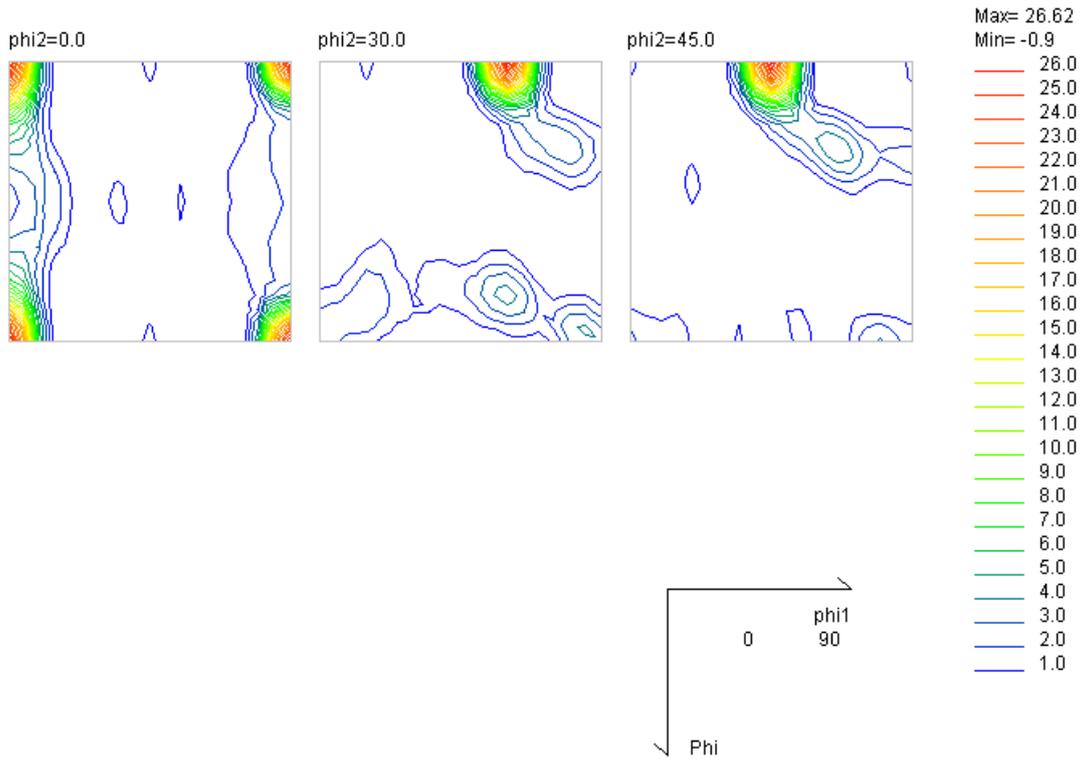
CTRパッケージソフトウェアのODFDisplayソフトウェアによる描画



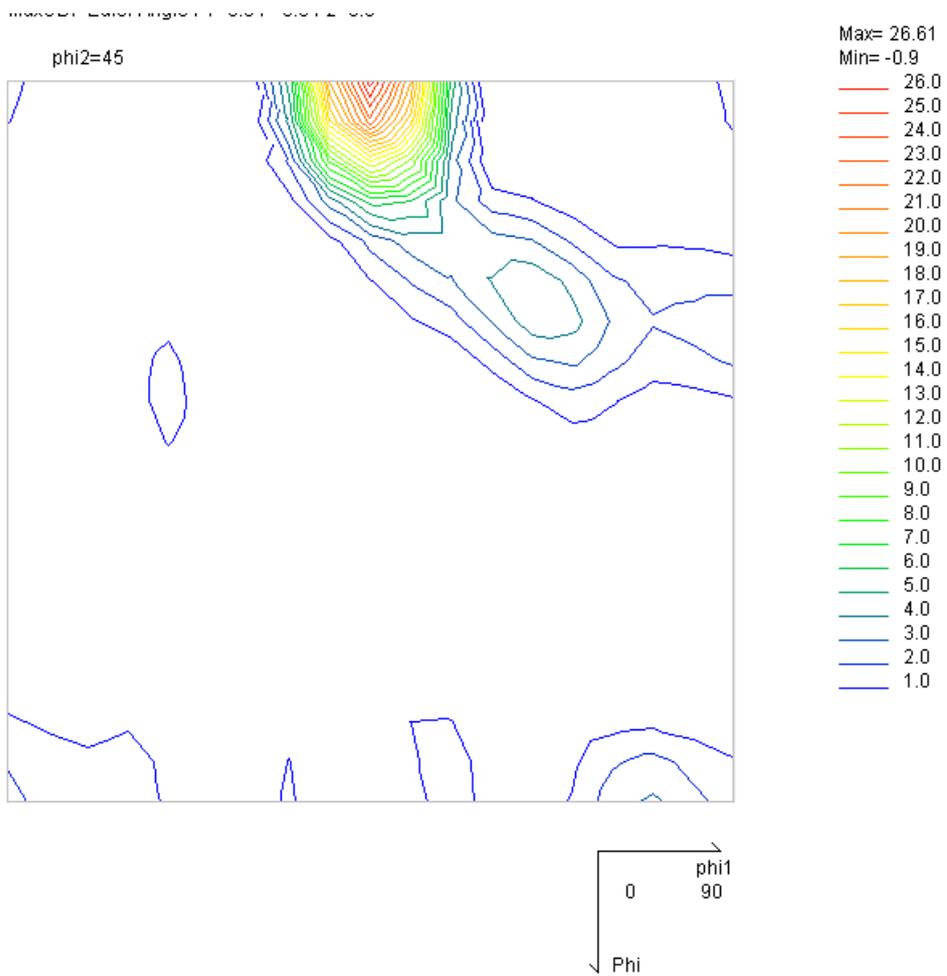
MaxODF Euler Angle F1=0.0 F=0.0 F2=0.0



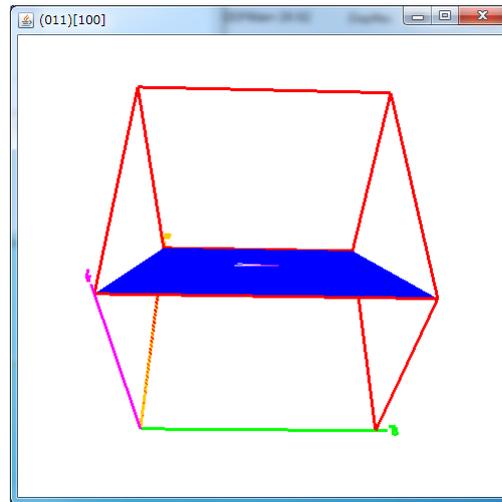
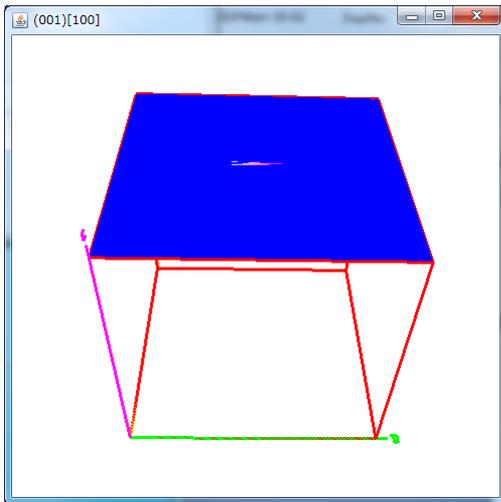
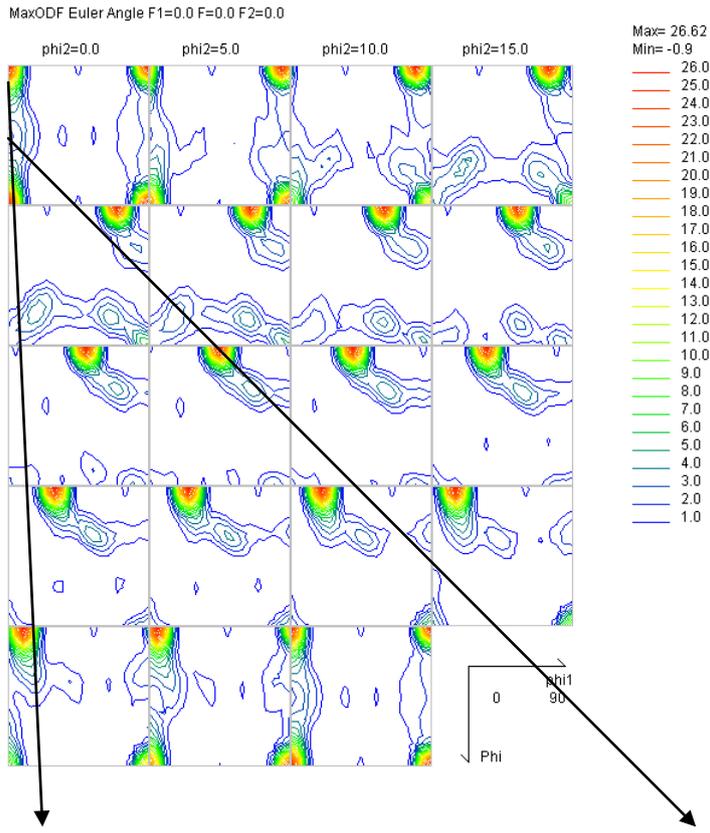
3 面標示



1 面表示



方位解析



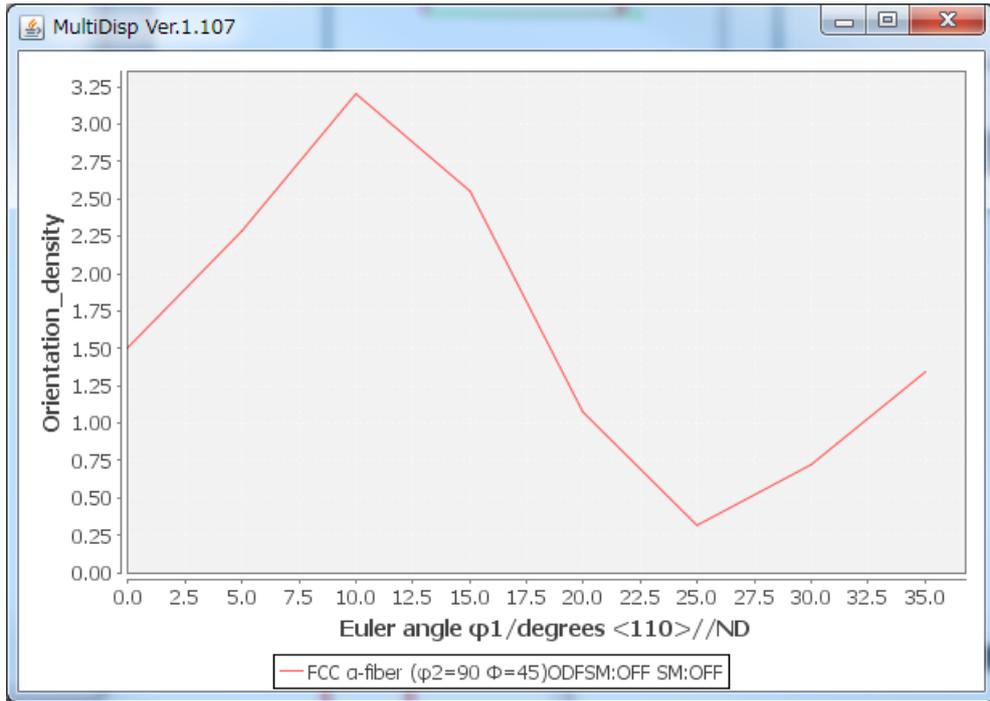
方位」L i s t 表示

TextDisplay 1.11S C:%CTR%work%ODFDisplay%ODF.txt

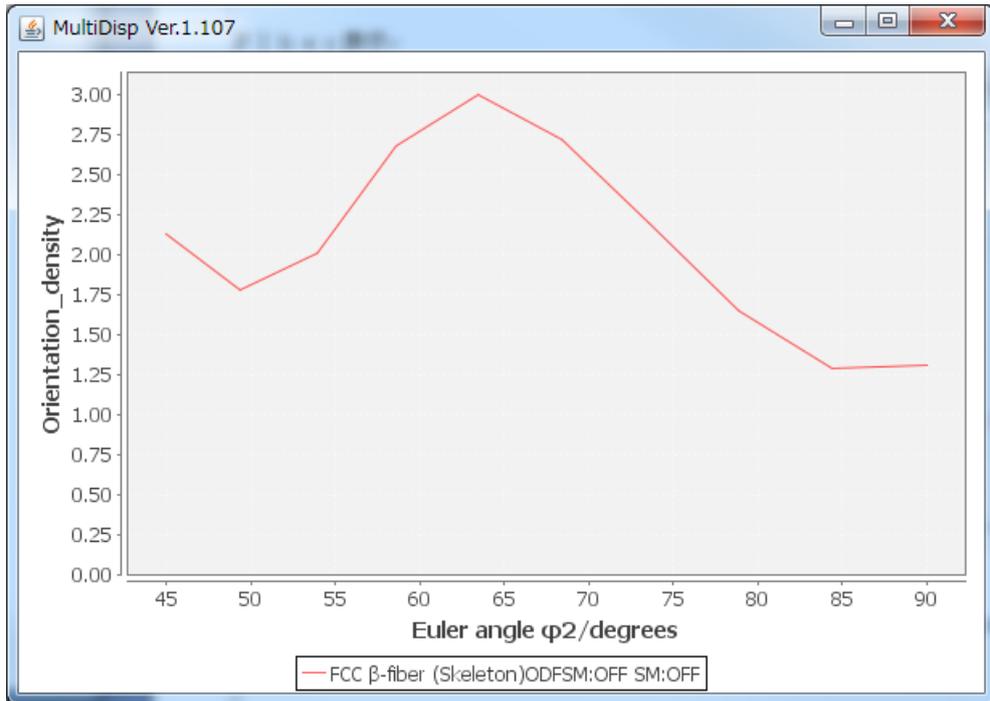
Orientation	φ_1	Φ	φ_2	ODF
{0 0 1}<1 0 0> cube	0.0	0.0	0.0	26.62
{0 1 3}<1 0 0>	0.0	18.43	0.0	7.26
{1 3 2}<6 -4 3> S	27.03	57.69	18.43	3.8
{2 1 3}<-1 -4 2> R	46.91	36.7	63.43	2.65
{1 1 2}<-1 -1 1> copper	90.0	35.26	45.0	2.12
{0 1 1}<2 -5 5>	74.21	45.0	0.0	1.68
{1 1 0}<0 0 1> goss	90.0	90.0	45.0	1.5
{1 1 0}<1 -1 2> brass	54.9	90.0	45.0	1.34
{0 0 1}<1 -1 0> RW	45.0	0.0	0.0	1.24
{1 1 0}<1 -1 1> P	35.26	90.0	45.0	1.14

Fiber表示

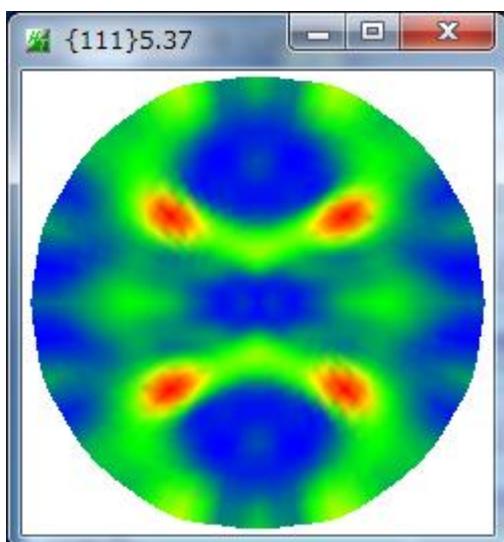
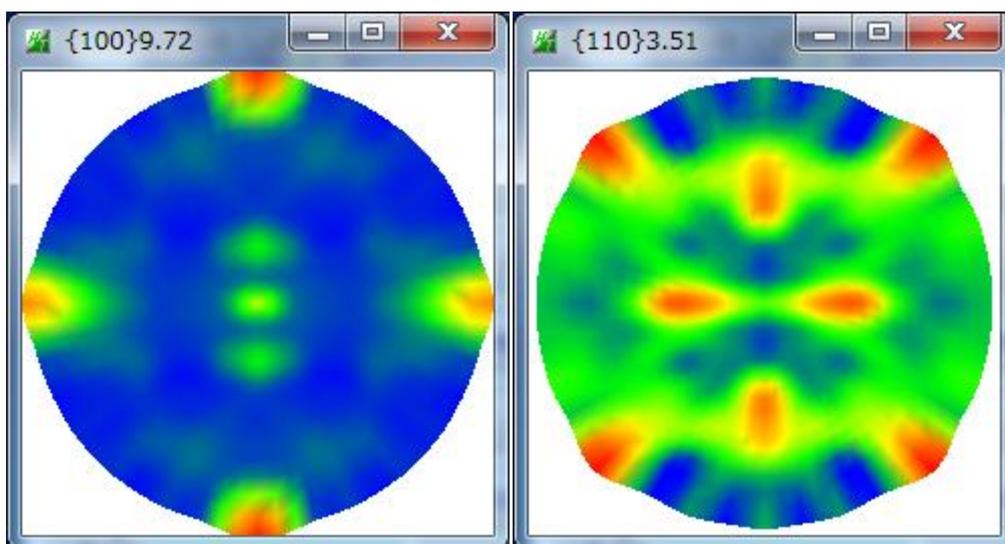
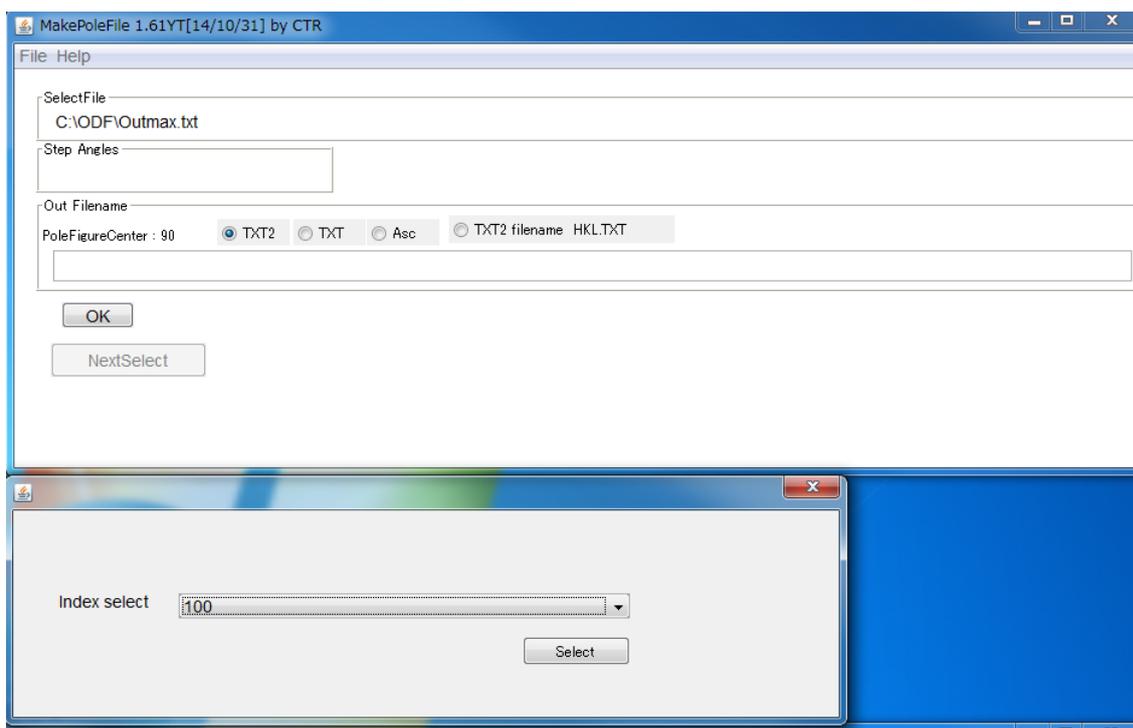
α -Fiber



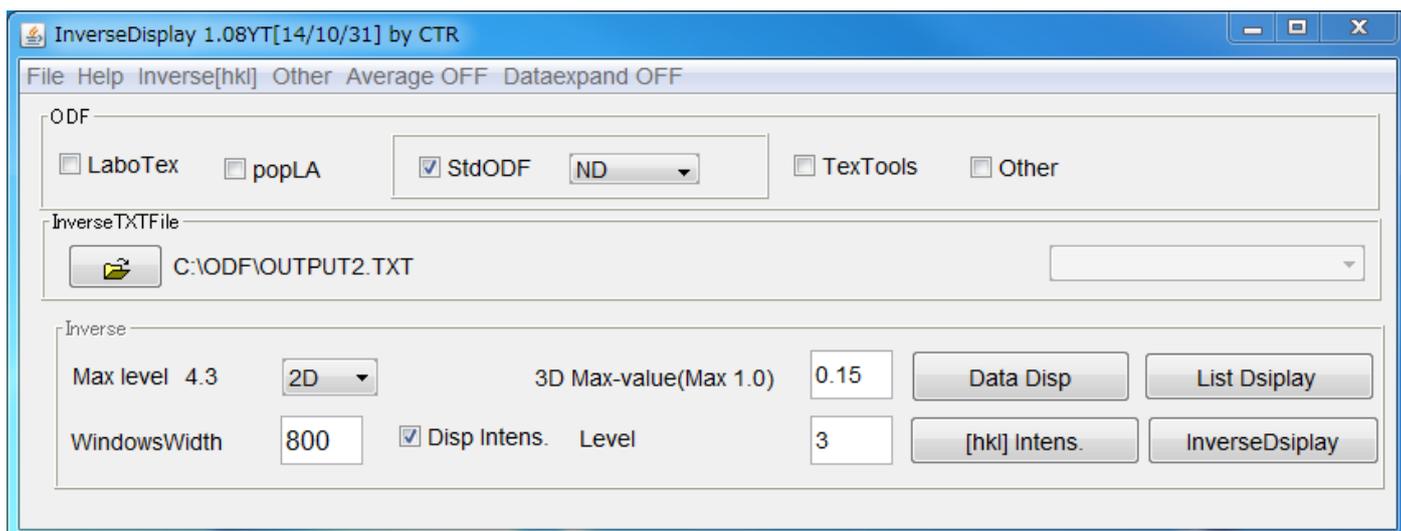
β -Fiber



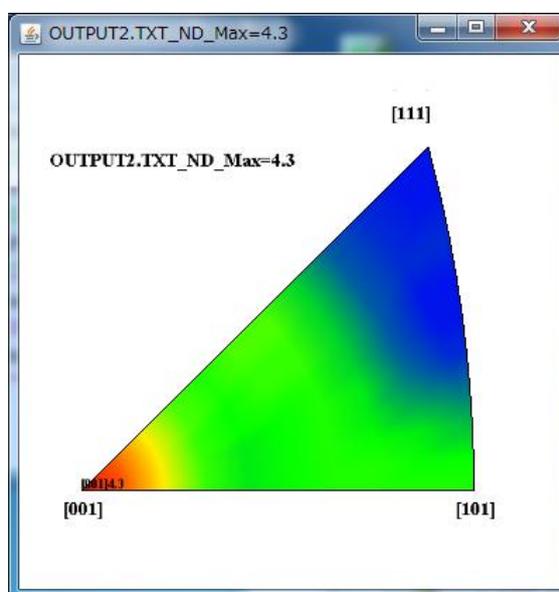
CTRパッケージソフトウェアによる再計算極点図描画



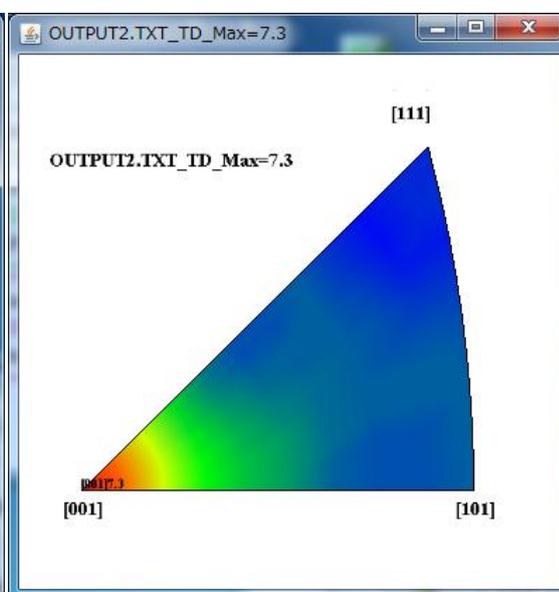
CTRパッケージソフトウェアによる逆極点図描画



ND



TD



RD

