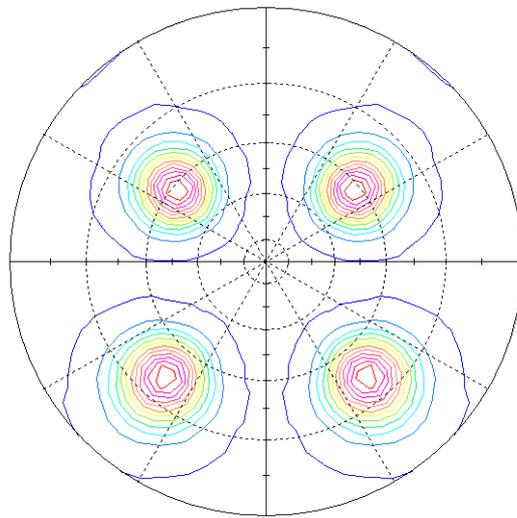


非対称極点図のODF解析



最近のODF解析ソフトウェアでは、極点図の対称操作をせずに、そのまま解析する事が可能です。対称性が失われた極点図では従来の結晶方位（cubeやgossなど）では説明出来ません。非対称ODF解析結果から方位解析を行い、結晶方位の定量を行います。

2014年07月15日



HelperTex Office

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

不明な点をご質問下さい。

XRD-source ¥ XRD-資料 ¥ 非対称極点図解析

概要

圧延された材料で、極点図が上下非対称で測定される場合があります。

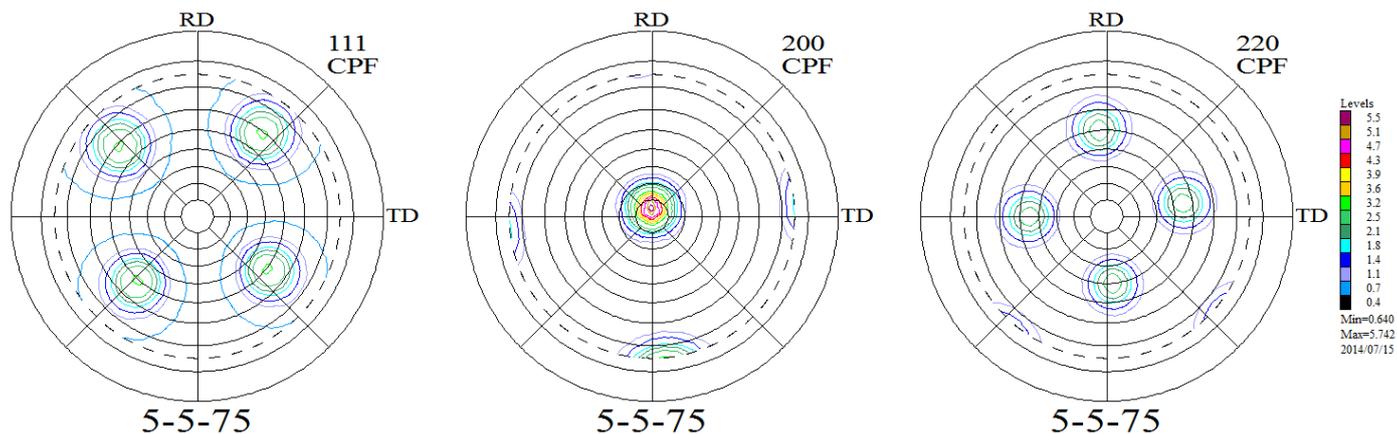
このような極点図を1/4対称として解析すると、真の方位測定が出来なくなります。

シュミレーションで非対称極点図を作成し、ODF解析を1/4対称と対称操作なしで比較を行った。

入力極点図

C u b e 方位の極点図を作成し、極点図の回転を行った。

極がRD方向5度、Z方向に5度回転しています。



目的

ODF解析を行い、入力極点図の完全極点図の作成と非対称V o l u m e F r a c t i o n 計算

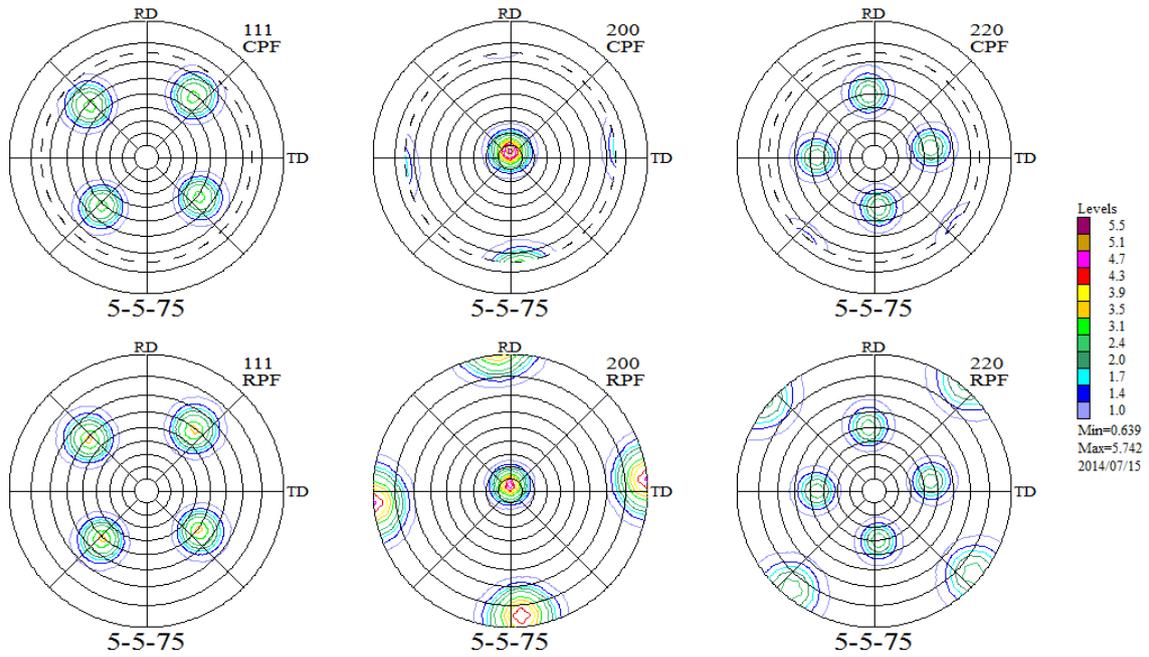
結果

非対称極点図の解析では、非対称ODF解析が行える環境が必要になります。

非対称でV o l u m e F r a c t i o n 計算が出来るODFはL a b o T e x ソフトウェアが便利です。しかし計算量が多いため、高速なコンピュータを勧めます。

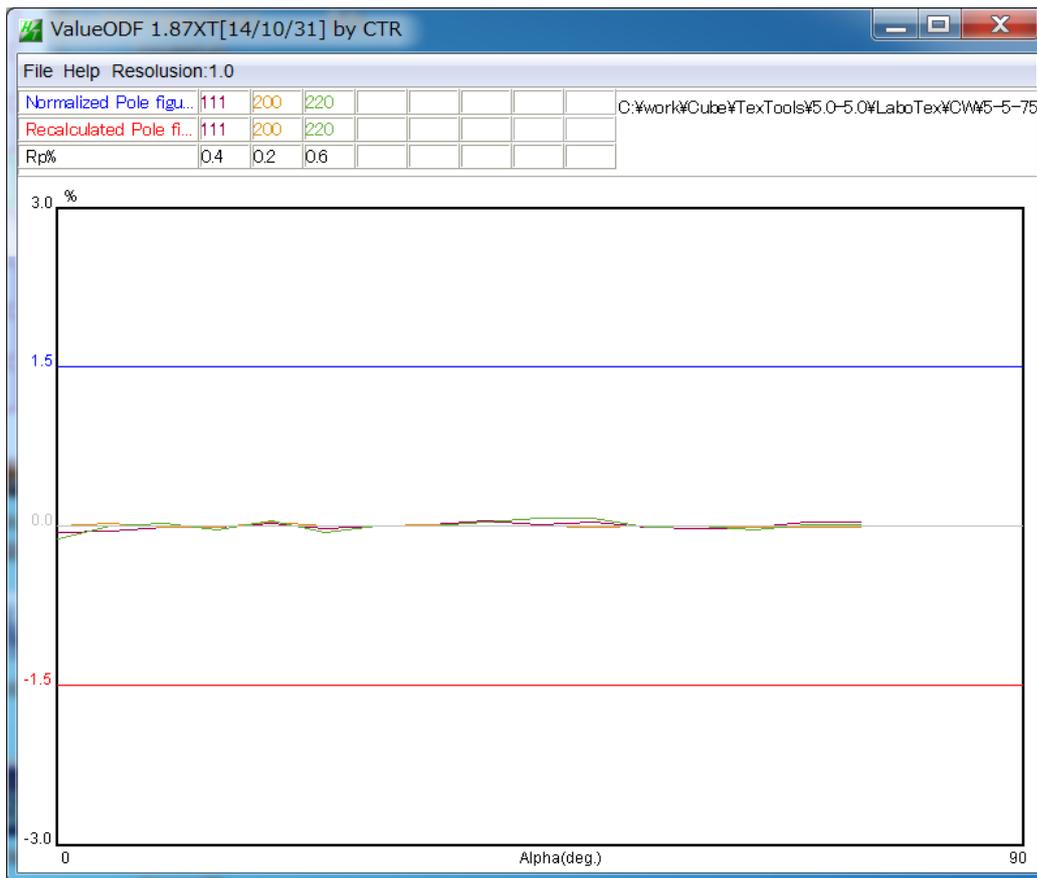
ODF 解析結果

非対称によるODF解析を行った場合 ($R_p = 0.98\%$, $dR_p = 1.81\%$)



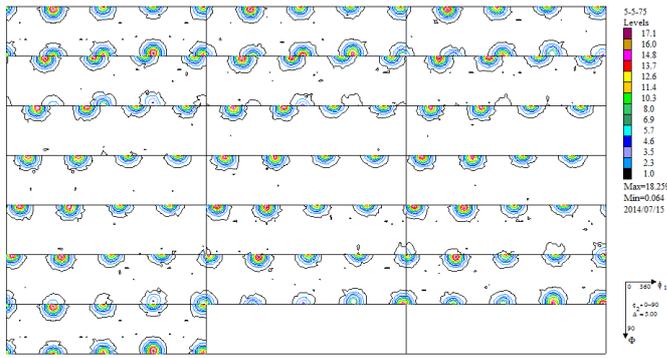
非対称極点図が再現されている。

入力極点図と再計算極点図の差をプロファイルで表現すると、

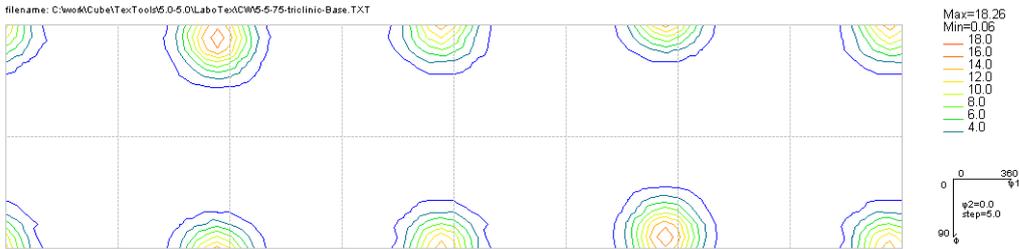


ほとんど一致している事から、完全にODF解析は正しい解析が行われていおます。

ODF図



$\phi = 0$ を見ると、Cube位置からずれた方位である事が分かります。(GPODFDisplay 使用)



新しい結晶方位の決定

ODF図上の極位置をマウスクリックし、方位を決めて、対称性を確認し方位を追加する。

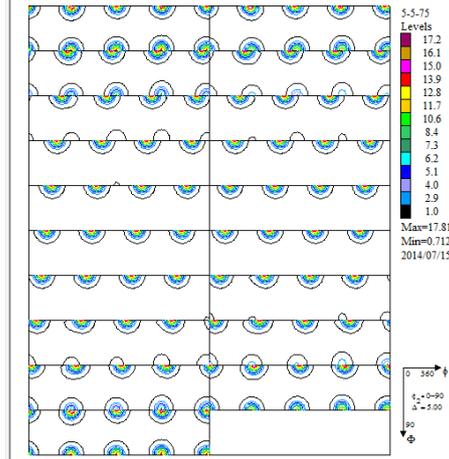
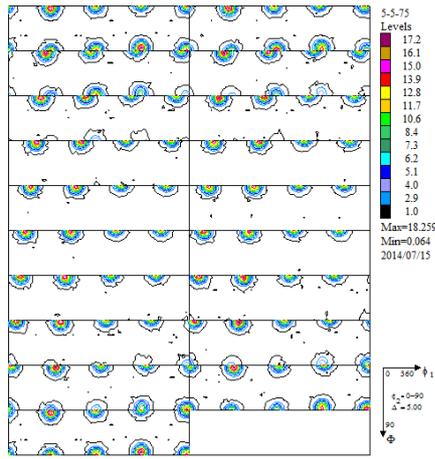
Approx. Miller Indices	Euler Angles
(0 1 0) < -11 0 1 >	[174.81, 90.00, 0.00]
(0 0 1) < 11 1 0 >	[354.81, 0.00, 0.00]
(0 1 0) < 11 0 1 >	[84.81, 90.00, 0.00]
(0 1 0) < 11 0 -1 >	[354.81, 90.00, 0.00]
(0 1 0) < -1 0 -1 >	[264.81, 90.00, 0.00]
(0 0 1) < -1 -11 0 >	[84.81, 0.00, 0.00]
(0 0 1) < -11 -1 0 >	[174.81, 0.00, 0.00]
(0 0 1) < -1 11 0 >	[264.81, 0.00, 0.00]
(1 0 0) < 0 11 1 >	[174.81, 90.00, 90.00]
(0 0 1) < -1 -11 0 >	[354.81, 0.00, 90.00]
(1 0 0) < 0 -11 1 >	[84.81, 90.00, 90.00]
(1 0 0) < 0 -11 -1 >	[354.81, 90.00, 90.00]
(1 0 0) < 0 1 -1 >	[264.81, 90.00, 90.00]
(0 0 1) < -11 -1 0 >	[84.81, 0.00, 90.00]
(0 0 1) < -1 11 0 >	[174.81, 0.00, 90.00]
(0 0 1) < 11 1 0 >	[264.81, 0.00, 90.00]

同様な事を他の極に対して試みる事で、定量対象方位を決定します。

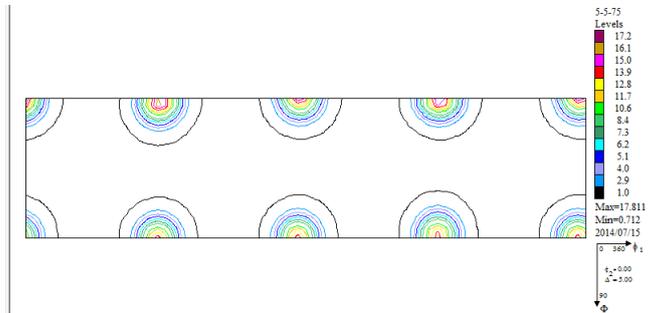
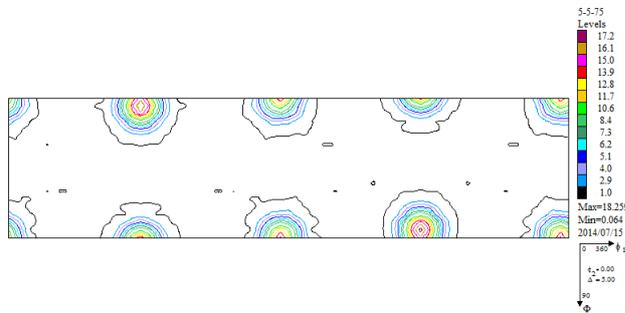
VolumeFraction 結果で比較

入力極点図から計算したODF 図

定量結果から計算したODF 図



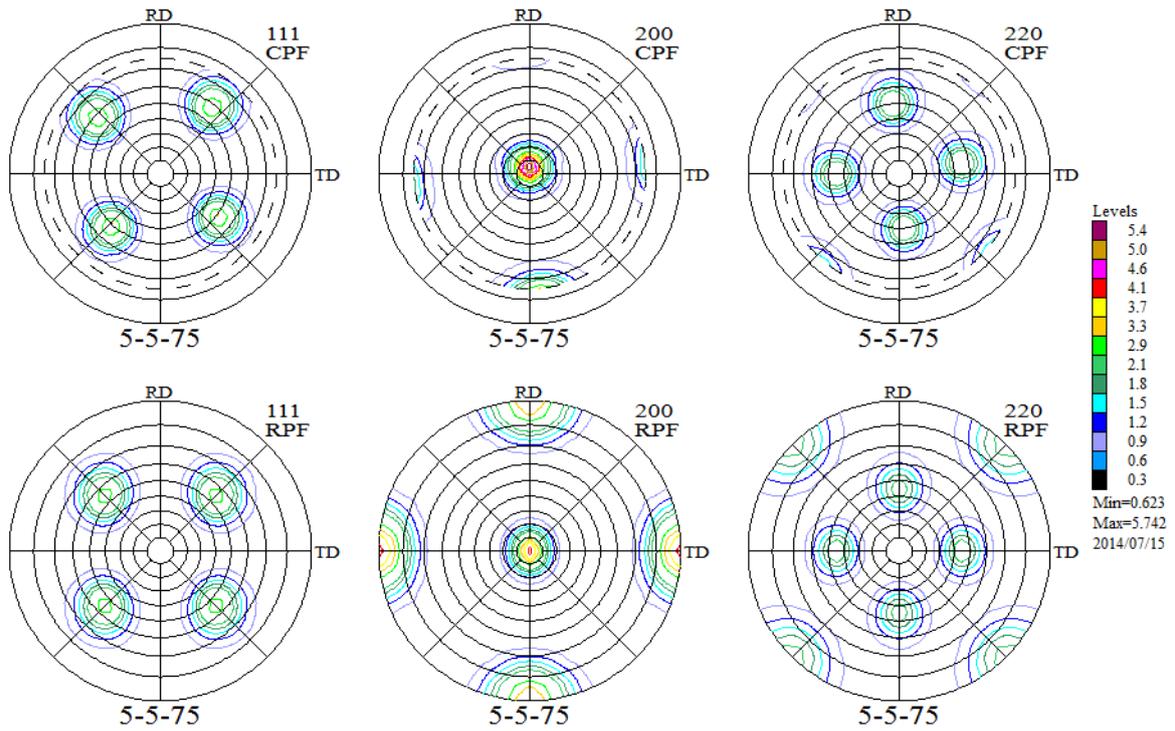
若干 cube が強く解析されています。



定量結果

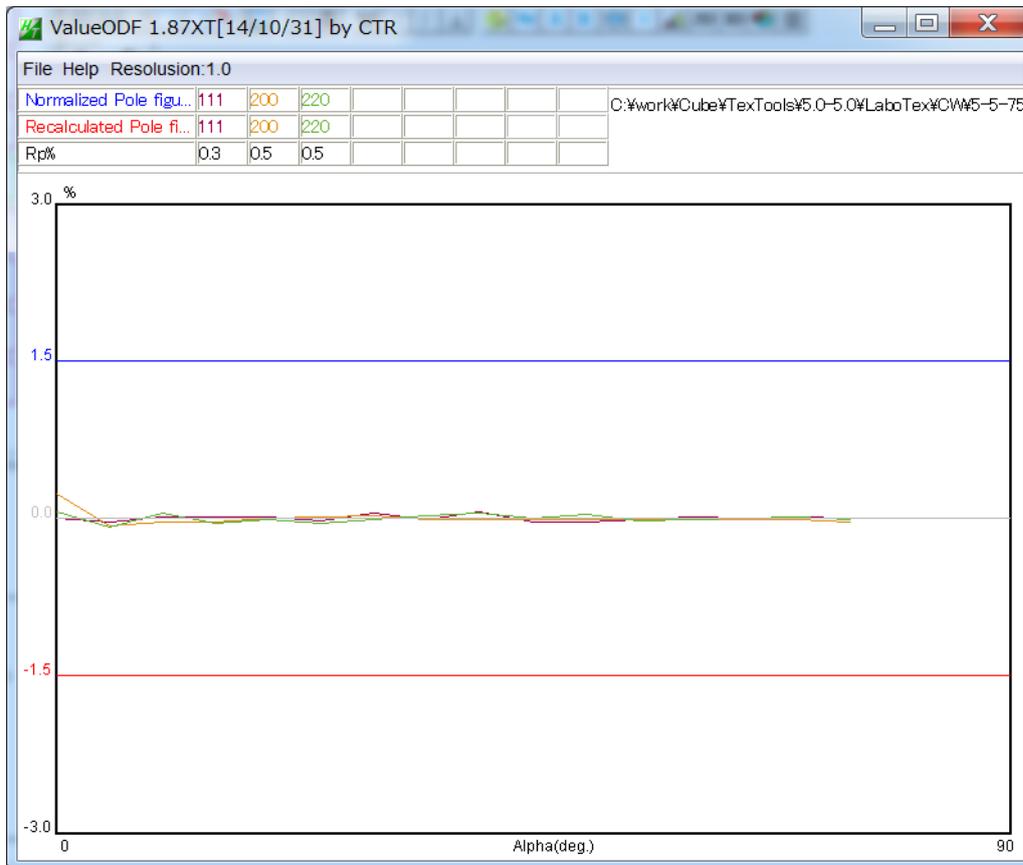
Nb.	VF(%)	Phi1(FWHM)	Phi(FWHM)	Phi2(FWHM)	Orientation
1:	7.2	21.2	24.0	24.8	{ 1 11 0 } K -11 1 1 >
2:	18.6	20.4	21.1	17.9	{ 0 1 0 } K -11 0 1 >
3:	3.0	25.7	31.2	34.9	{ 0 0 1 } K 1 0 0 > cube
4:	71.18				Background Volume Fraction

1/4 対称でODF解析を行った場合 (Rp = 0.99%, dRp = 2.18%)



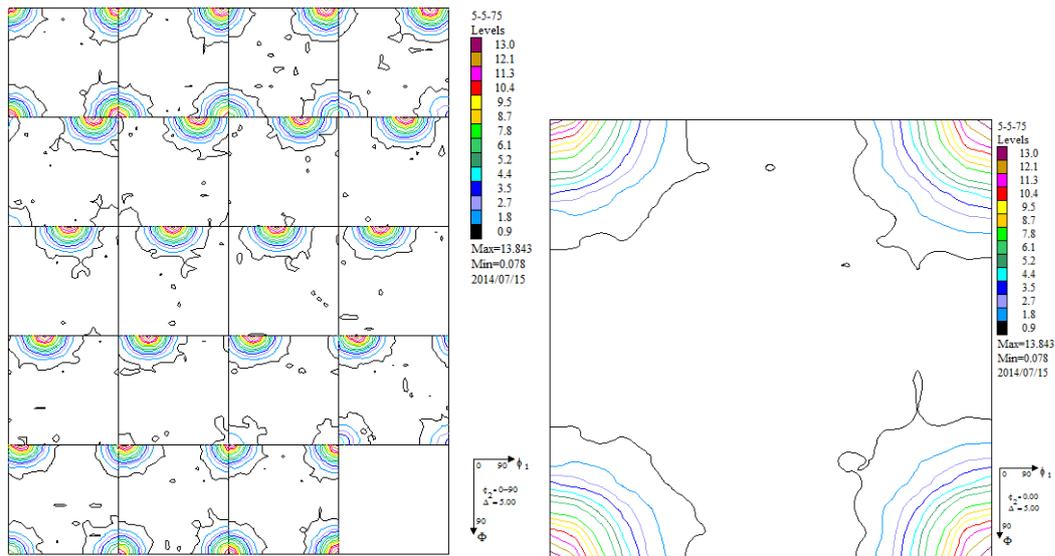
1/4 対称操作により、平均値はCube方位になってしまう。

入力極点図と再計算極点図の差



β 方向の平均値で比較を行っているで、極点図の中心付近に若干の違いが見とめられるがほとんど問題なし

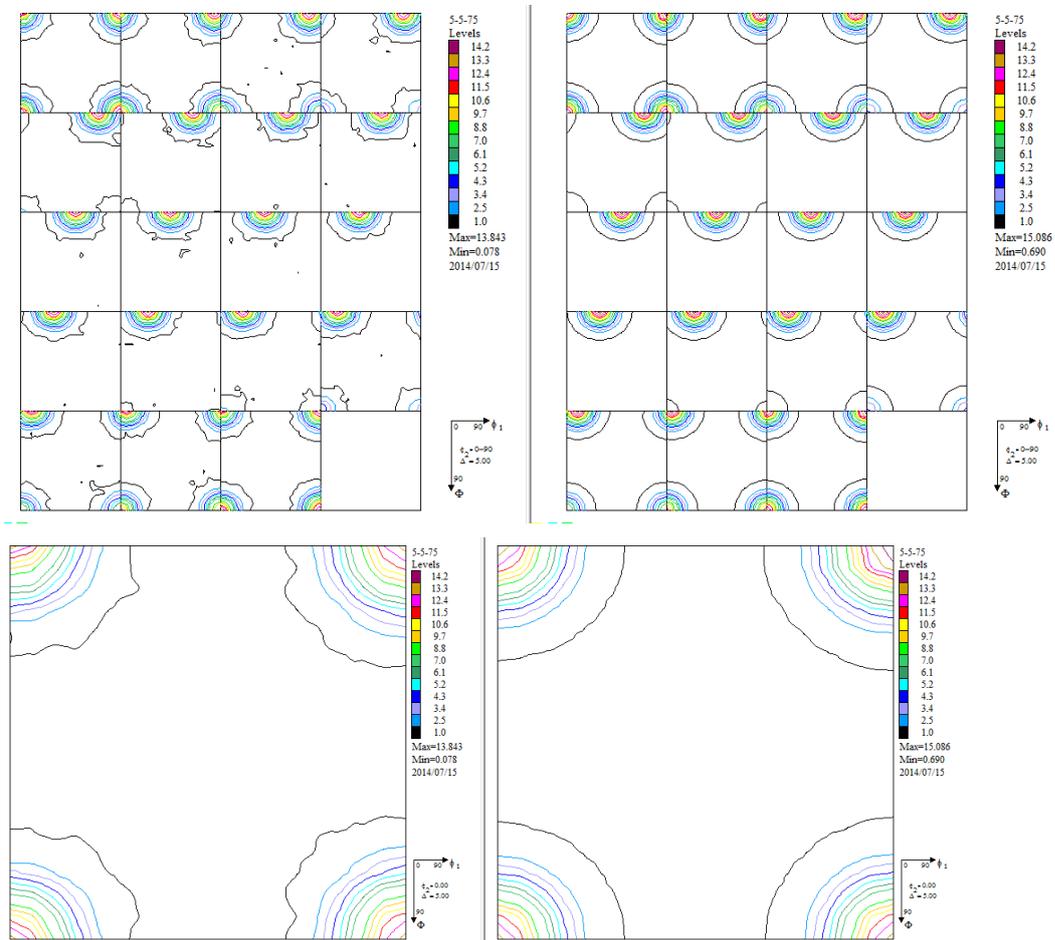
ODF 方位図



VolumeFraction 結果で比較 (比較の為に、非対称解析と同じ方位で計算を行った)

入力極点図から解析されたODF 図

定量結果から計算されたODF 図



定量結果

No.	VF(%)	Phi1(FWHM)	Phi(FWHM)	Phi2(FWHM)	Orientation
1:	16.5	20.9	20.2	21.1	$\{ 0 \ 0 \ 1 \} \mid 1 \ 0 \ 0 \rangle$ cube
2:	10.2	27.3	24.3	25.5	$\{ 0 \ 1 \ 0 \} \mid -11 \ 0 \ 1 \rangle$
3:	4.5	23.2	26.8	24.0	$\{ 1 \ 11 \ 0 \} \mid -11 \ 1 \ 1 \rangle$
4:	68.86	Background Volume Fraction			

1 / 4 対称操作で、C u b e 方位が強くなってしまう。