

説明内容

集合組織解析技術

- 前回研究部会標準試料の配向評価
- 非対称極点図
- Helgonal極点図の扱い

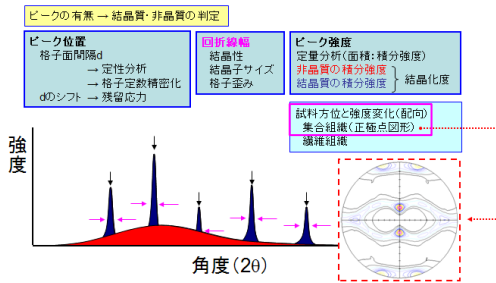
2015年03月11日

HelperTex Office

山田 義行

E-Mail:odftex@ybb.ne.jp
http://www.geocities.jp/helpertex2

X線回折データ



X線回折の応用

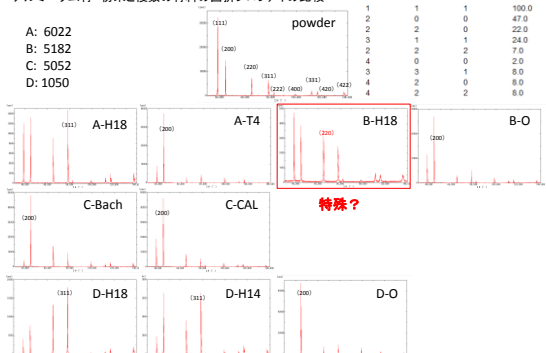
	注目する回折図形	解析目的
広角測定	回折線の位置・強度	定性分析・定量分析・結晶構造 格子定数精密化
	回折線の幅	結晶子の大きさと格子歪み
	回折強度の試料方位依存性	集合組織・配向(結晶方位の偏り)
	回折角度の変化量	残留応力
小角測定	非晶質ハロー・結晶質ピーク強度比	結晶化度
	非晶質ハローの強度分布	動径分布関数(非晶質の構造解析)
定	周期性ピーク的位置	周期構造の積層周期
	方向性	配向性
	散漫散乱線の拡がり・強度分布	粒径分布解析

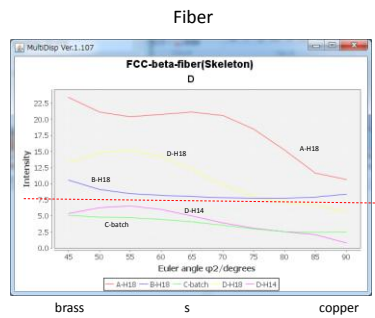
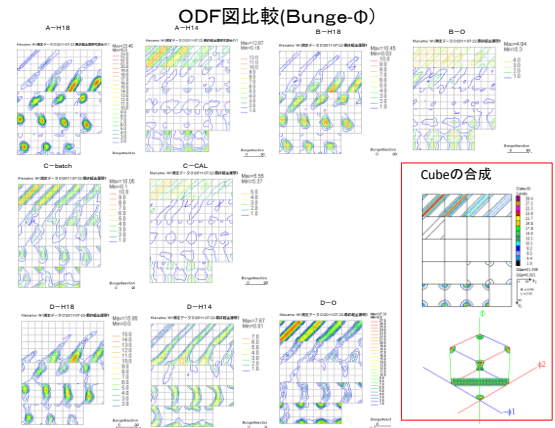
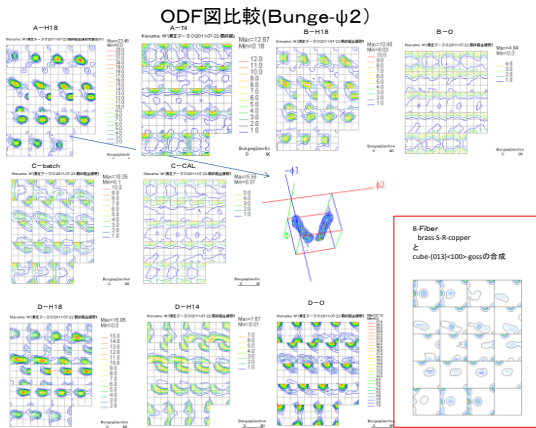
XRDによる配向評価

- X線回折プロファイルから配向評価
- 回折強度比較で逆極点図、Lotgering法
- 極点図比較
- ODF図比較
- VolumeFraction比較

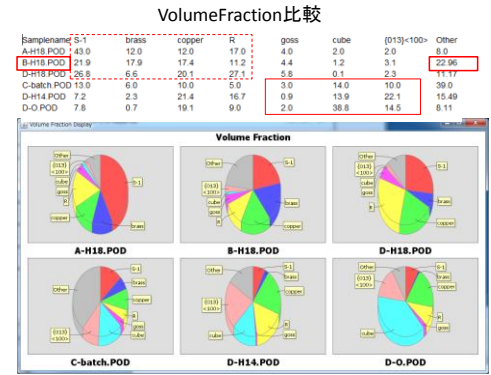
配向 (Preferred) Orientation

特定の回折線が強く観察される現象(方位の偏り)
アルミニウム材 粉末と複数の材料の回折プロファイルの比較



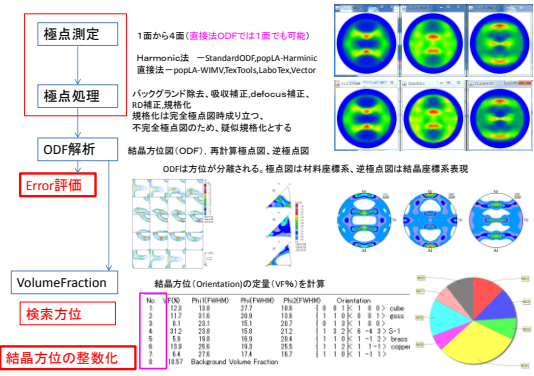


極点図、ODF図、Fiber図では定量的ではありません。



VolumeFractionを計算する事で、数値で比較出来ます
VolumeFractionを計算する為にはError評価と結晶方位の整数化が問題になります

極点測定からODF、VolumeFraction

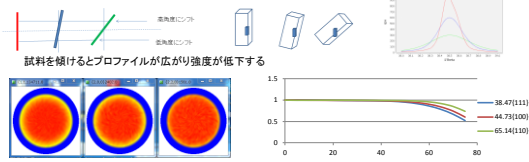


ODF解析Error

入力極点図のdefocus
極点図に他成分の混入

defocus

Random試料でも、極点図の外側で強度が低下する



JOURNAL OF APPLIED PHYSICS VOLUME 41, NUMBER 10 1 DECEMBER 1974

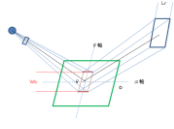
Defocusing for the Schott Technique of Determining Preferred Orientation*

K. THOMSON

Old Ship, Federal Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37830

(Received 15 January 1974; in final form 1 April 1974)

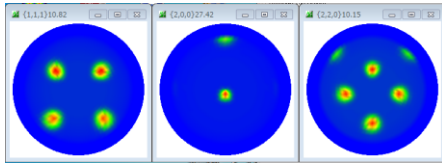
$$\frac{I_d(\theta, \phi, \psi, \lambda, \sigma)}{I_d(\theta=0, \phi=0, \psi=0, \lambda, \sigma)} = 1 - \frac{2}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{-\lambda d(PF) \cos \theta} \exp(-y^2/2) dy$$



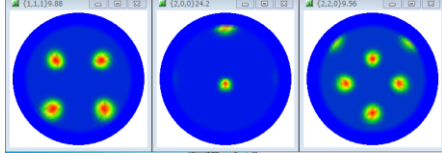
パラメータは、φ: 傾角 (α)、θ: 測定2θ角度、LR: 受光スリット幅、WB: 試料上のビーム高さ

Defocus補正

Defocus補正なし



Defocus補正あり



補正ありのMax極密度が低下しているのは、外周部分の密度が上昇したため

直接法ODF解析の計算打ち切り指定

計算打ち切りによって、計算結果が異なる

LaboTex

Maximal Number of Iterations per Iteration Cycle: [70]

RP (Max) - Maximal Relative Error Finishing Calculation (%): [0.1]

dRP (Max) - Max. Differential Error Finishing Calculation (%): [0.1]

TexTools

Iteration Controls

Iteration controlled by the number of loops: []

Iteration controlled by the increased error between the experimental and re-calculated pole figures: []

Iteration stops when the error (> 0) is less than: [0.1]

Iteration stops when any of the following conditions satisfied: []

Iteration stops when the number of loops reached: []

or when the error (> 0) is less than: [0.1]

Rp% : 入力極点図と再計算極点図の偏差
dRp% : 繰り返し計算中の変化率

ODF解析のError

LaboTex: ODF解析直後に画面表示

StandardODF: C:\ODFOUTPUT1\Fファイル
再計算極点図部に

ERROR = 2.48% [100]
ERROR = 1.50% [110]
ERROR = 1.07% [111]

があるが、Rp%ではなさそう???

TexTools: HODFファイル

3	31	0.0100	0.1787
		0.0	
		13.1692	11.1760
		6.9397	0.8247
		0.8277	0.8805

Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Pole	13.8	8.8	10.8

Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Pole	11.3	10.4	11.3

Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Pole	10.3	11.2	10.8

Rp%が大きい
defocus補正が不十分
極の成分が変化している
例えば、Fe材料のBCC(110)とFCC(111)成分が
重なっている

$$RP_{[hkl]} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{PF_{exp} \{i\} - PF_{calc} \{i\}}{PF_{exp} \{i\}} \right| \cdot 100\%$$

複数極点図の中から、Error大きい極点図を特定するには、極点図をExportとしてValueODFVFソフトウェアで調べる

TexToolsのRp%

ODF Calculation Setup

Iteration controls: []

Resolution: []

Text Format of ODF File (Arbitrary Resolution) 1HNP23H (by ResMat):

```

1: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
2: 19 194:
3: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
4: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
5: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
6: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
7: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
8: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
9: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
10: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
11: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
12: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
13: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
14: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
15: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
16: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
17: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
18: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
19: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
20: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
21: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
22: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
23: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
24: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
25: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
26: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
27: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
28: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
29: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
30: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
31: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
32: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
33: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
34: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
35: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
36: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
37: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
38: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
39: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
40: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
41: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
42: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
43: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
44: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
45: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
46: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
47: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
48: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
49: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
50: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
51: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
52: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
53: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
54: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
55: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
56: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
57: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
58: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
59: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
60: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
61: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
62: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
63: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
64: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
65: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
66: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
67: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
68: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
69: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
70: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
71: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
72: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
73: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
74: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
75: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
76: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
77: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
78: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
79: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
80: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
81: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
82: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
83: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
84: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
85: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
86: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
87: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
88: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
89: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
90: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
91: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
92: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
93: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
94: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
95: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
96: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
97: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
98: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
99: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:
100: 1.00 1.00 1.00 90.00 90.00:

```

ValueODF-VF

ValueODFVF 2.01VF by CTR User: CTR Help: Tex

File Help Resolution 5.0 EqualAngle TestDisplay

LaboTex-TFF

RIGAKU-ODF

TexTools-POL

TexTools-RINTXT

Standard ODF

NEWIOF

PrintDisplay

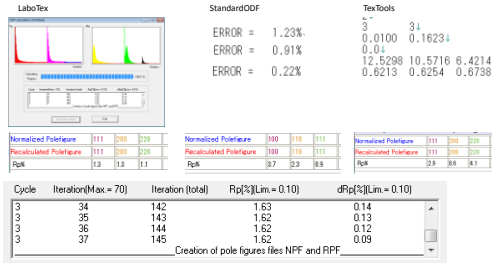
Exit

Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Pole	13.8	8.8	10.8

α=0は極点図の中心

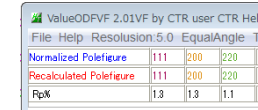
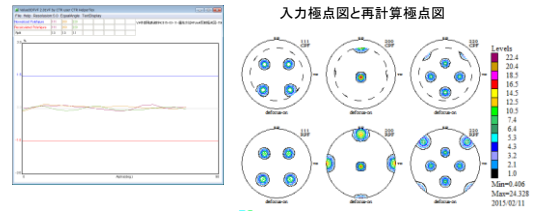
全ての極点図で右下がりの傾向
極点図の外側付近が下がるのは、defocus補正が不十分

Defocus補正ありのODF解析

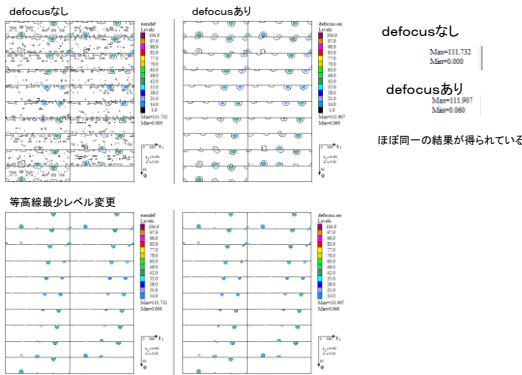


Rp%が下がっている事が確認出来ます。
 極点図をExportしてValueODF-VFで確認します。

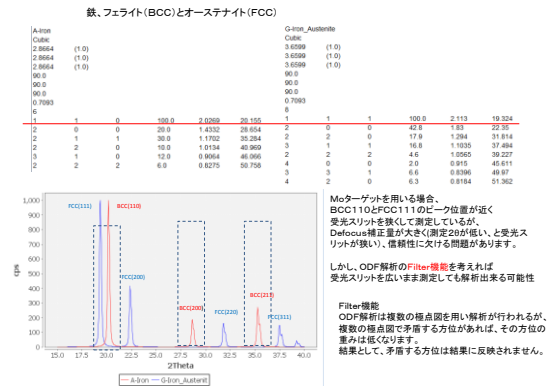
ValueODF-VF



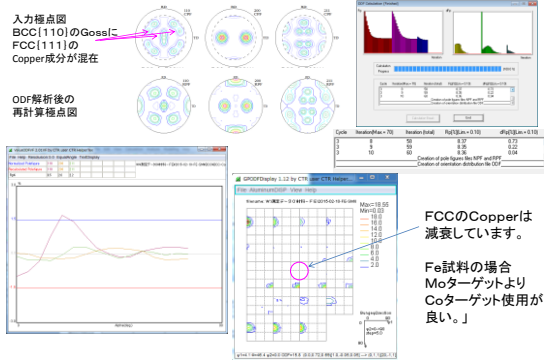
defocusON-OFFによるODF



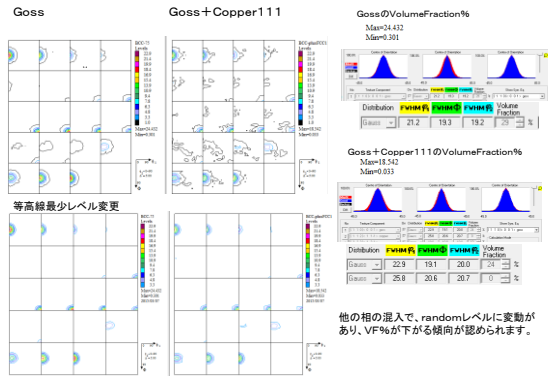
多成分が重なっている場合



Goss(BCC)にCopper(FCC)が混在している場合



GossとGoss+Copper111のODF



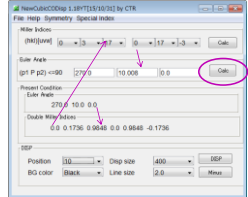
VolumeFractionのマトメ

- 対称極点図の場合、ODF解析結果から求めたODF図とVolumeFraction結果のODF図は一致する

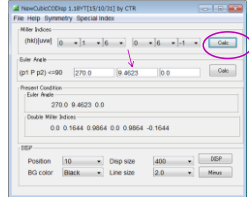
Euler角度からMiller index整数化の問題

$$\begin{aligned}
 h &= n \sin \phi \sin \psi_2 \\
 k &= n \sin \phi \cos \psi_2 \\
 l &= n \cos \phi \\
 m &= n' (\cos \psi_1 \cos \psi_2 - \sin \psi_1 \sin \psi_2 \cos \phi) \\
 n &= n' (-\cos \psi_1 \sin \psi_2 - \sin \psi_1 \cos \psi_2 \cos \phi) \\
 n' &= n' \sin \psi_1 \sin \phi
 \end{aligned}$$

最大指数99とした場合



最大指数15とした場合



整数化したMiller indicesでは、全てのEuler空間の表現は出来ません。指数の最大値を制限すると、更にEuler空間が狭くなります。

ODF図からEuler角度を読み込む場合、ステップ幅の問題もあります。例えば 5方位 (132)←43> (27.03, 57.69, 18.43) 5度のステップでは、5方位の確認は難しい

マウスカーソルからEuler角度を得る限界 (GPODFDisplay)

マウス操作で極品方位を得る場合
マウスクリックした位置 (+) と結晶方位から得られた位置 (O) は異なります。
又、マウス情報には限界があり、コンピュータの画面から得られるXY情報は整数です。
マウスクリックだけで正確なEuler角度を得る事は出来ません。
このような場合は、euler角度の手入力サポートも必要になります。

Euler角度とMiller indexの関係

Cubicの場合

$$\begin{aligned}
 h &= n \sin \phi \sin \psi_2 \\
 k &= n \sin \phi \cos \psi_2 \\
 l &= n \cos \phi \\
 m &= n' (\cos \psi_1 \cos \psi_2 - \sin \psi_1 \sin \psi_2 \cos \phi) \\
 n &= n' (-\cos \psi_1 \sin \psi_2 - \sin \psi_1 \cos \psi_2 \cos \phi) \\
 n' &= n' \sin \psi_1 \sin \phi
 \end{aligned}$$

Tetragonal, OrthorhombicでもCubicとして計算可能

格子定数をa, b, cとする。
Euler角度 (φ₁, φ₂) → 結晶方位 (hkl) <uvw> の関係

$$\begin{aligned}
 h/a &= n \sin \phi \sin \psi_2 \\
 k/b &= n \sin \phi \cos \psi_2 \\
 l/c &= n \cos \phi \\
 u/a &= m (\cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi) \\
 v/b &= m (-\cos \phi_1 \sin \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi) \\
 w/c &= m \sin \phi_1 \sin \phi
 \end{aligned}$$

(hkl) <uvw> → (φ₁, φ₂)

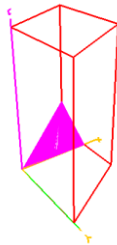
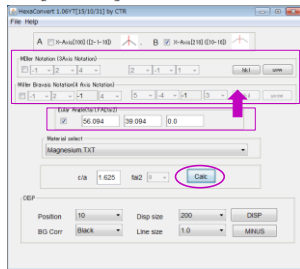
$$\begin{aligned}
 H &= h/a, K = k/b, L = l/c, U = u/a, V = v/b, W = w/c \\
 \cos \Phi &= 1/\sqrt{H^2 + K^2 + L^2} \\
 \cos \phi_1 &= K/\sqrt{H^2 + K^2} \\
 \sin \phi_1 &= W/\sqrt{U^2 + V^2} \\
 X &= \sqrt{U^2 + V^2 + W^2} \\
 Y &= \sqrt{(H^2 + K^2 + L^2) / (H^2 + K^2)}
 \end{aligned}$$

HexagonalのEuler角度から方位計算

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \\ t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & c/a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sin \phi_1 \sin \phi \\ \cos \phi_1 \sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n \\ t \\ t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & c/a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n \cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi \\ -\cos \phi_1 \sin \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi \\ \sin \phi_1 \sin \phi \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n \\ t \\ t \\ 0 \end{bmatrix}$$

非対称極点図

- メーカにより測定方法が異なる
- ODFにより極点図データの回転方向が異なる
- TD軸に非対称極点図を考える



メーカーにより測定方法が異なる

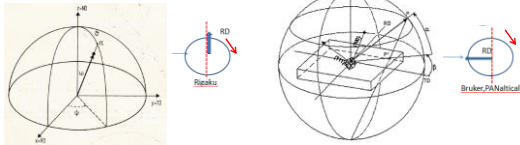
測定 (シンチレーションカウンタの場合)
 Rigakuは、X線入射方向に対し、RDは垂直方向、試料回転方向は時計回り(CW)
 Bruker、PANalyticalは、X線入射方向に対し、RDは平行、試料回転方向はCW

データ(ファイル)

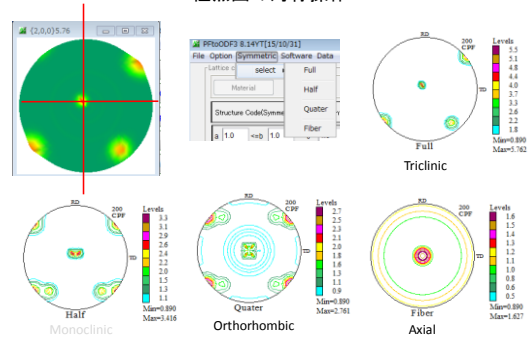
Rigakuは、RD->TDに回転で、データスタートはRD
 Bruker、PANalyticalは、TD->RDに回転し、データスタートはTD

ODF入力極点図

LaboTexは、RDからスタート、データ回転はCW (ClockWise)
 他のODFは、RDからスタートして、データ回転はCCW (Counter ClockWise)
 α軸は、極点図の中心(O)から外側へ



極点図の対称操作



非対称極点図とODF

LaboTexで転晶方位 [051] < 41-5>、半価幅 12.5deg, VolumeFraction 10% をModellingL、再計算極点図 [111], [200], [220] をExportLし、LaboTexとTexToolsで極点図データの面転方向と計算される転晶方位を検証します。非対称のデータは各ODF内的一致ですが極点図データ面転方向でODF図が変わります。しかし、RD軸に對称な極点図であれば、ODF図は同一です。

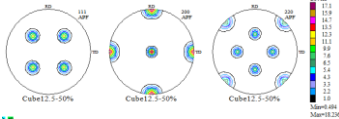
入力極点図と再計算極点図は、各ODFによる極点図の回転軸、ODF図は、各ODF図による面転軸が異なる。modcopyで複製しています

非対称極点図(RD軸に對称の場合)

RD軸に對称な場合は、非對称極点図でも、一般形で同一のODF図が得られます。

極点図がTD軸に回転している場合の解析

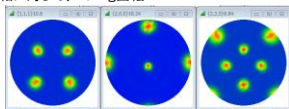
LaboTexでcube FWHM=12.5deg,VF 50%をModellingLExport



極点図TD軸に回転させる方法

ODF図のEuler角度回転
 極点図をTD軸に回転させる

PFRotationでTD軸に対して、-10deg回転



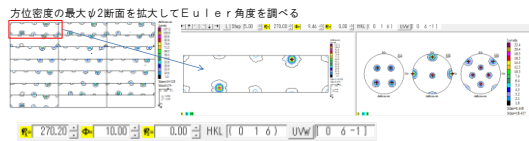
非対称極点図の解析

測定データ 極点処理結果

Cycle	Iteration (Max = 70)	Iteration (local)	Fit(3) (Min = 0.10)	dFit(3) (Min = 0.10)
1	24	142	1.62	0.13
2	26	143	1.62	0.13
3	27	145	1.62	0.10

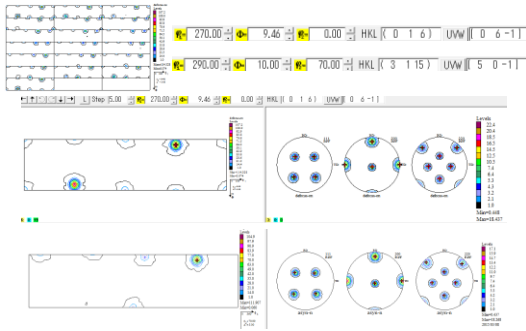
Creation of pole figures: Max, NPF and RPF

Errorは少なく解析されている事を確認

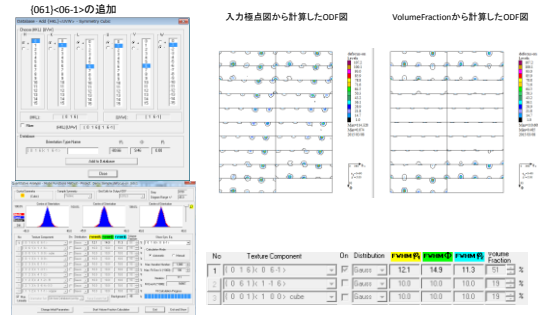


最大φ=10degであるが、整数化すると、9.46になってしまう
 このようは方位は登録されていないので、VolumeFractionを行う場合
 自動で検出されないで、方位の登録を行います。

ODF解析

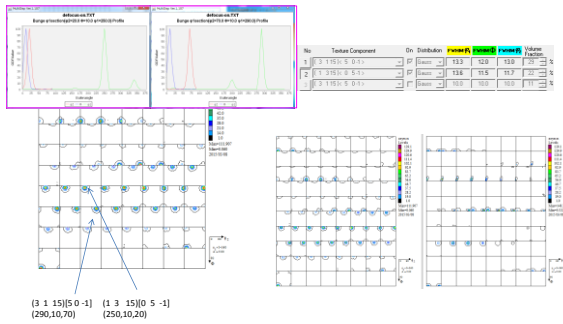


VolumeFraction (結晶方位の定量)



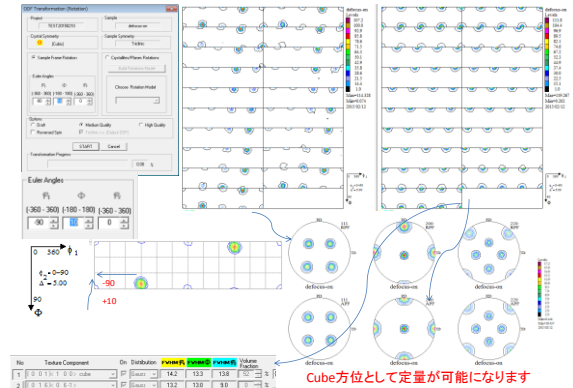
非対称極点図の入力ODF図とVF%のODF図は一致しない

ψ1断面から方位計算



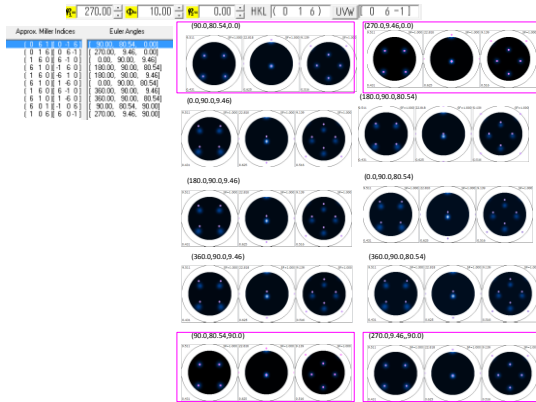
ψ2, ψ1断面から方位を決定し、VF%求めると51%であるが、計算されたODF図は一致しない (hk)uvwでVF%を計算しているためか？

VolumeFrcn (Euler角度の回転)

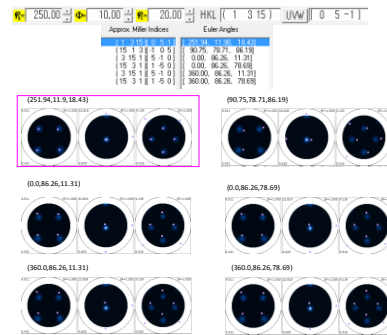


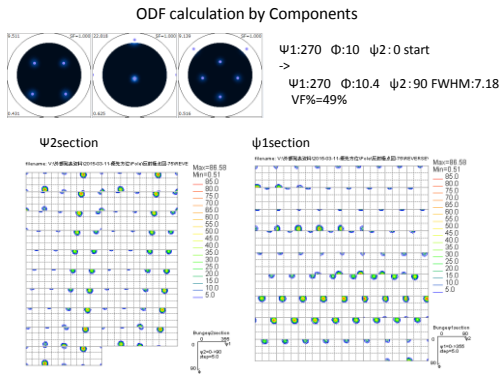
Cube方位として定量が可能になります

シミュレーション

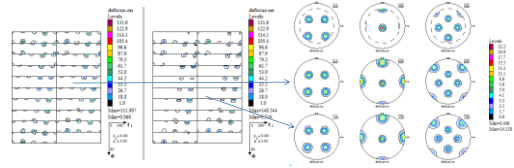
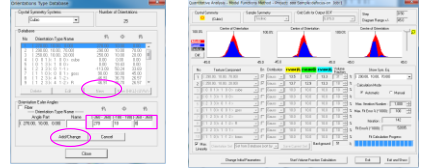


シミュレーション





LaboTexでEuler角度からVF%計算を追加
 DataBaseにEuler角度追加 Euler角度によるVolumeFraction計算



非対称極点図のVolumeFraction

- ODF解析結果に対し{hkl}<uvw>でVolumeFractionを求められるが危険で、その結果のODF図はODF解析結果と一致しない
- 非対称極点図からODF計算し、Euler角度の回転によりODF図を回転し、対称ODF図とすれば、{hkl}<uvw>からVolumeFractionを求める事が出来る。
- 非対称極点図に対し、直接Components法でODF解析すればVF%とODF図が計算可能であるが、{hkl}<uvw>に対するVF%を求めるのではなく、Euler角度に対するVF%が計算される

Hexagonal

- 配向度関数
- 3指数<->4指数表現
- 直交軸の取り方
- ODF解析

追加
 LaboTexのDataBaseにEuler角度を登録すれば、非対称極点図のVF%の計算は可能

配向関数(Tetragonal)

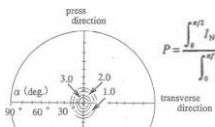
Nd-Fe-B 磁石の成形体および焼結体の X線配向度評価

高木 繁, 横田 顕, 岡本 篤樹

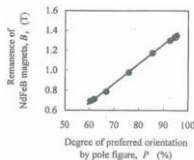
住友特殊金属技術開発本部, 〒618-0013 大阪府三島郡島本町江川 2-15-17.

磁石材料の重要な特性の一つに残留磁束密度 (B_r) がある。

Nd-Fe-B 焼結磁石の場合、磁石中に占める Nd₂Fe₁₄B 主相の体積比が一定ならば、主相の磁化容易軸 (c 軸) の向きがそろえば、すなわち結晶配向度が高いほど、磨磁後の残留磁束密度は大きくなる。さらに一箇の磁石の全ての部分で、主相の c 軸方向が同じ方向にそろっていることが均質で高性能な磁石を得る上で重要である。



$$P = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I_N(\alpha) \sin \alpha \cos \alpha \, d\alpha \, d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I_N(\alpha) \sin \alpha \, d\alpha \, d\phi} \times 100$$



Relation between the degree of preferred orientation using pole figure and the remanence of Nd-Fe-B magnets composed under various magnetic fields.

Fig.3 Example of X-ray pole figure of sintered Nd-Fe-B magnet. Figures of the normalized intensity I_N are indicated.

配向関数 (Hexagonal)

材料座標系に対して方位の偏りを計算する

磁石の中心を原点、c 軸、磁石の作製方向 z 軸とした場合、

$$I = I_0 \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I(\alpha, \beta) \sin \alpha \, d\alpha \, d\phi$$

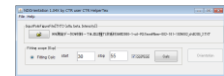
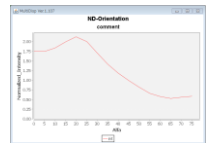
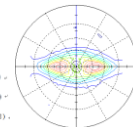
$$I = I_0 \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I(\alpha, \beta) \sin \alpha \, d\alpha \, d\phi$$

$$I = I_0 \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I(\alpha, \beta) \sin \alpha \, d\alpha \, d\phi$$

$$I = I_0 \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I(\alpha, \beta) \sin \alpha \, d\alpha \, d\phi$$

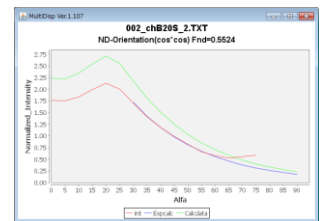
$$I = I_0 \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I(\alpha, \beta) \sin \alpha \, d\alpha \, d\phi$$

$$I = I_0 \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I(\alpha, \beta) \sin \alpha \, d\alpha \, d\phi$$



NDに対し、c軸方向に極端に偏っていれば(0001)極点図の周辺には極が存在しない(0001)反射極点図を測定し、周辺部分を外排して完全極点図として、ND方向の配向関数を計算する。

これは、ND方向にa軸でも極端に偏っていれば適用可能です。



Hexagonal 3指数 <-> 4指数

Direction <uvw> to <UVTW>

$$U = (2u-v)/3$$

$$V = (2v-u)/3$$

$$T = -(u+v)/3$$

$$W = w$$

for example:
 <100> is equal <-2-1-10>
 <210> is equal <10-10>

Plane {uvw} to {UVTW} :

$$U = u$$

$$V = v$$

$$T = -(u+v)$$

$$W = w$$

for example:
 {2-10} is equal {2-1-10};
 {10-10} is equal {100}

Direction <UVTW> to <uvw> :

$$u = U-T$$

$$v = V-T$$

$$w = W$$

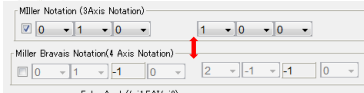
for example: <2-1-10> is equal <100>

Plane {UVTW} to {uvw} :

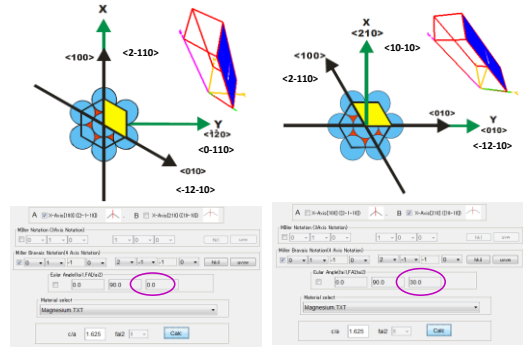
$$u = U$$

$$v = V$$

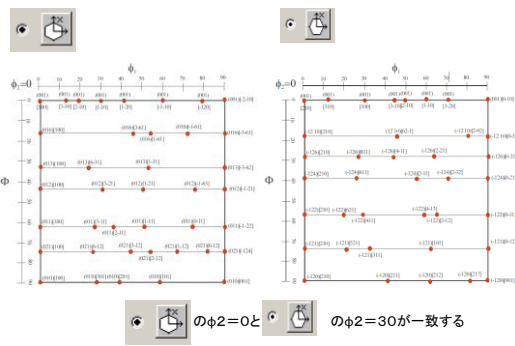
$$w = W$$



Hexagonal直交軸の取り方



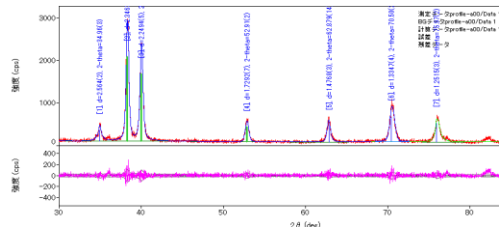
Magnesiumのφ2=0断面



φ2=0とφ2=30が一致する

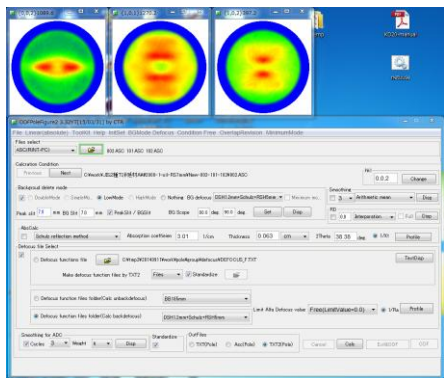
Hexagonal(Ti)のODF

Rigaku-PDXL



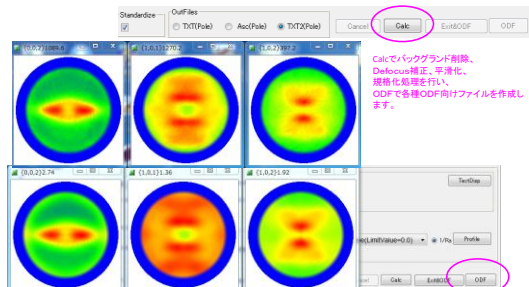
No.	2θ	d	高さ	FWHM	積分強度	積分強度	積分強度	高角電子	結晶サイズ	結晶相
1	34.9923	2.56423	2003.0	0.2620	100.0	0.1120	1.2724	1.2724	253(2)	alpha_Ti(1.0)
2	38.3819	2.36633	1699.0	0.3690	66.60	0.4923	0.958	0.625	240(4)	alpha_Ti(1.0)
3	41.4913	2.24843	1179.0	0.3660	44.90	0.4430	1.101	0.610	221(4)	alpha_Ti(1.0)
4	52.9123	1.79297	548.0	0.4794	19.20	0.680	1.30	0.412	194(7)	alpha_Ti(1.0)
5	62.8743	1.62663	391.0	0.368	12.10	0.857	2.93	0.261	114.0	alpha_Ti(1.0)
6	70.5023	1.50474	656.0	0.628	47.00	0.770	0.811	0.549	160(4)	alpha_Ti(1.0)
7	75.923	1.39153	457.0	0.485	35.0	0.760	0.891	1.368	114.0	alpha_Ti(1.0)

測定データと解析



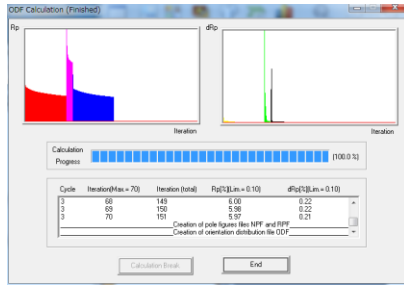
データ処理は一括に行う事で、操作ミスをおこないます。

一括データ処理



極点図は、{hkl}規格化極密度を表示

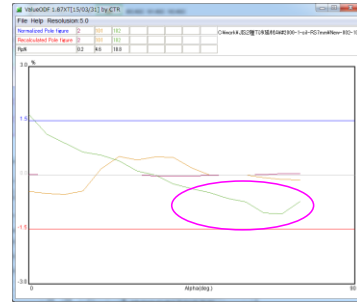
LaboTex - Error表示



Rp%は入力極点図と再計算極点図の差
dRp%はODF図のerrorを表現しています。

Rp%=5.97→入力極点図に若干のerrorが含まれている。

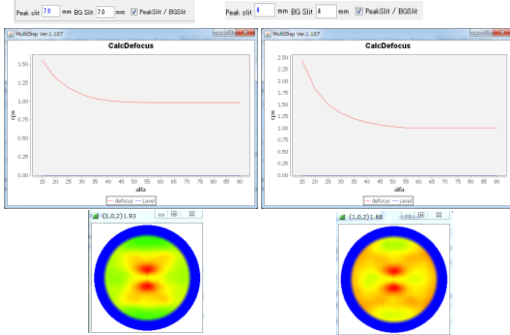
Export極点図評価



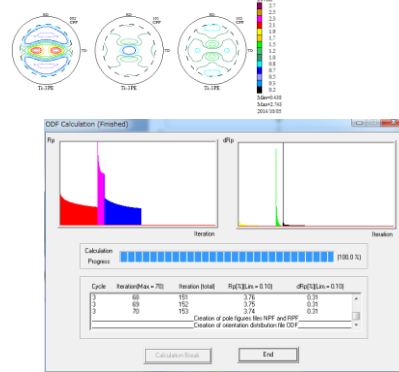
[102]極点図のdefocus補正量が少ない

Defocus補正修正

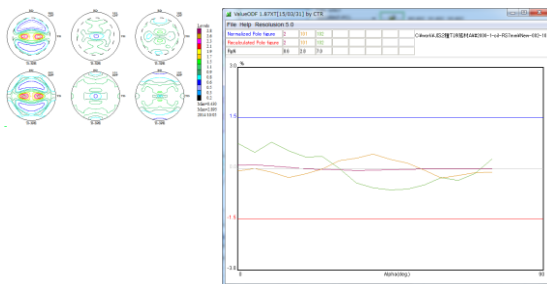
Defocusは、受光スリット幅と測定2θに依存しています。
今回、[102]極点図のdefocus補正を大きくするために受光スリット7mm→4mmに変更



ODFの再計算

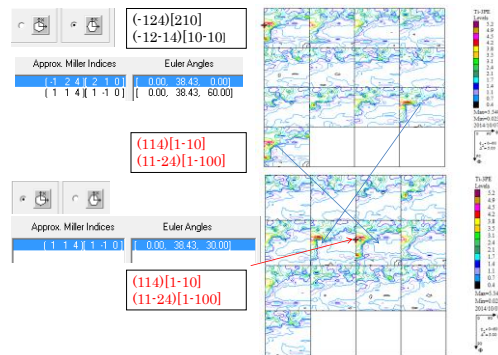


ODF再計算結果のError評価



入力極点図と再計算極点図が差が改善されています。

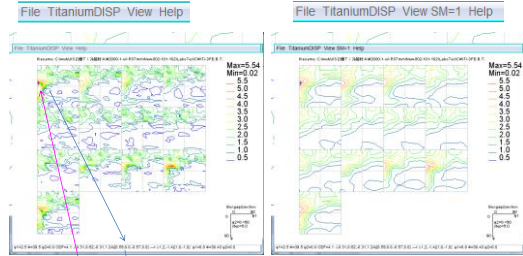
BType-AType



Atypeφ2 = Btypeφ2 - 30degである。

ODF図の平滑化(GPODFDisplay)

LaboTexのODF図描画はギャシャクしたODF図で、平滑化機能が搭載されているが、ODFをExportすれば平滑化が可能になります。



マウスクリックで結晶方位も4指数で計算します

h140 k 400 l 0 s240 s ODF4 T 10 3.0 0.3 1.27 (0 58 0.0 2.58 0.0) → 1 1 2 1 0 1 1 0 1 0 0 400 413 020 0

結晶方位図

Miller Nortion (3Axis)->Miller-Bravais Nortion(4Axis)

3指数から4指数とEuler角度を計算しています

論文などからLaboTexに結晶方位登録

大阪府立大井上先生「チタンおよびチタン合金の集合組織」より

表1 チタンおよびチタン合金のα相集合組織における主要方位とそのオイラー角

集合組織のタイプ	軸の向き	方位 (hkl) [uvw]	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3
Basal	NDに平行	(0001) [1010] (0001) (2110)*	0° 30°	0° 0°	0° 0°
T (Transverse)	TDに平行	(1120) [1010] (0110) (2110)*	0° 0°	90° 90°	0° 30°
R (RD)	RDに平行	(1120) [0001] (0110) (0001)*	90° 90°	90° 90°	0° 30°
TD-split	NDからTDの方へ ±30° ~40° 傾く	(1120) [1010] (0110) (2110)* (0210) (2110)*	0° 0° 0°	32.4° 31.4° 36.0°	0° 30° 30°
RD-split	NDからRDの方へ ±20° ~30° 傾く	(1120) (1101) (0110) (2110)* (0110) (0332)	90° 90° 90°	21.0° 24.6° 31.4°	0° 30° 30°

(hkl)[uvw]
(001)[210]
(001)[100]

(-120)[210]
(010)[100]

(-120)[001]
(010)[001]

(-125)[210]
(013)[100]

(-124)[210]
(025)[100]

(-128)[041]
(014)[-241]
(-126)[031]
(013)[-362]

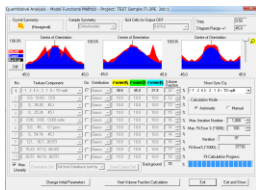
(hkl) [uvw] の欄において、*印の方位はその上の方位と間に [0001] 軸まわりの30°回転関係が成立する。

DataBaseへ登録

Atype-Btypeを意識して登録しましょう

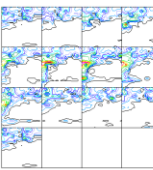
(-124)[210]の登録

VolumeFraction

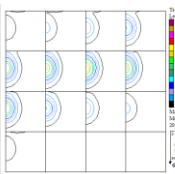


No.	VPOD	Phi1(FWHM)	Phi2(FWHM)	Phi3(FWHM)	Orientation
1.	22.1	218	43.8	31.9	1 1 2 4 0 2 1 0 1 0 0 400 413 020 0
2.	77.8	Background	Volume Fraction		

入力格点図から計算したODF図



VolumeFractionから計算したODF図

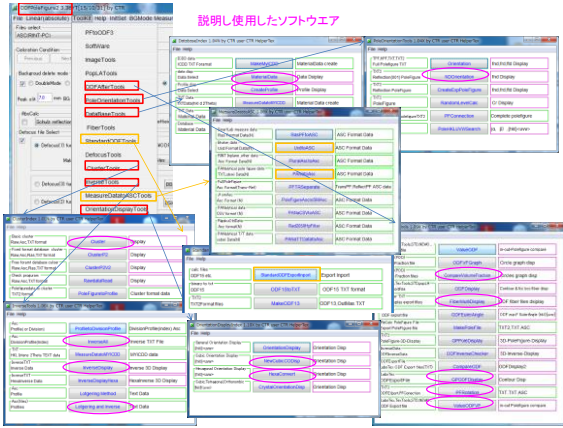


HelperTex Office

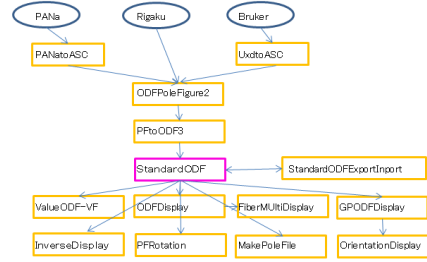
今日、説明に使用した各種ソフトウェアが収録されたCDです。使用期限付きですが、正規版と同一です。お試しください。



Files	2015/03/10 7:45	ファイルフォルム	243 KB
INSTALL.DAT	2015/03/07 16:30	DAT ファイル	243 KB
INSTALL	2015/03/14 17:42	アプリケーション	603 KB
ML_readme	2015/03/07 15:59	Adobe Acrobat	177 KB
集合組織解析技術	2015/03/10 7:38	Adobe Acrobat	7,191 KB

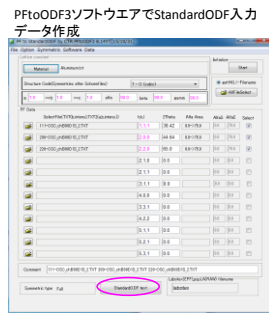
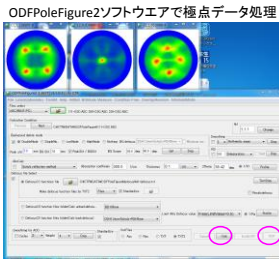


StandardODFとCTRソフトウェア

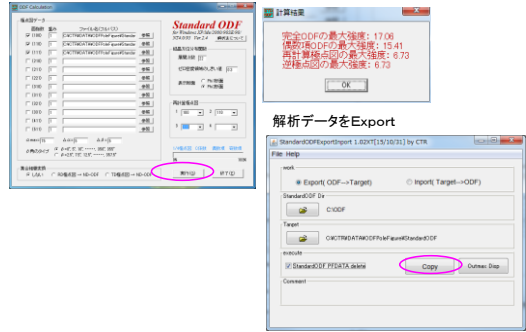


StandardODFによるデータ処理

StandardODF

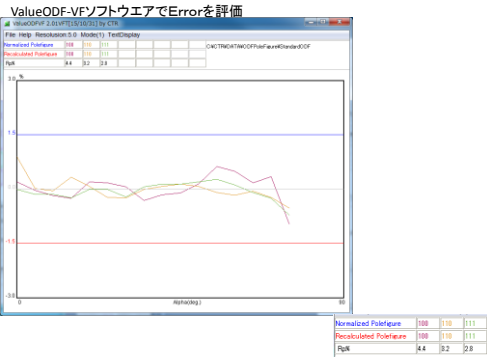


StandardODFでODF解析



StandardODFをvalueODF-VF

ODF結果



ODFDisplayソフトウェアで方位密度List作成

