

極点図測定から結晶方位の定量に関して

XRD の極点測定から極点図を表示する事は簡単に出来るが、極点図から ND-RD の関係 ND 面{hkl}、RD 方向<uvw>を得ることは難しい。又、単一の{hkl}<uvw>の存在は単結晶であり通常は複数の結晶方位が存在する。極点図から複数の結晶方位を特定し、各々の量を計算する事は無理である。この難しい処理に関して ODF 解析を用いると、自動的に計算出来ます。

測定から解析は以下の順で行う。

測定

バックグラウンドを正確に測定する。

システム特有な d e f o c u s 量を正確に測定する。

解析

バックグラウンド除去

d e f o c u s 補正

材料が薄い場合吸収補正

ODF 解析

測定 E r r o r の把握

本説明書は、結晶方位の定量を理解していただく為に、

特定の結晶方位が存在する場合、

どのような ODF 図が描けるか

その極点図は

の順序で説明し

逆に

極点図→ODF 図→結晶方位の定量

を説明します。

極点データから極点処理を行い、ODF 解析が体験出来る試用ソフトウェアを提供致します
以下のメールアドレスへご請求下さい。

2013年01月25日

HelperTex Office

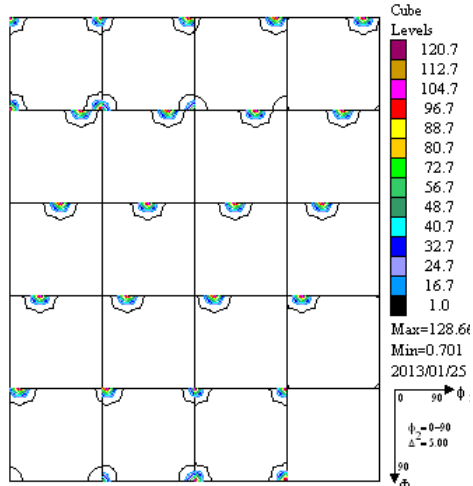
odftex@ybb.ne.jp

特定の結晶方位 Cube 方位、Copper 方位、S 方位が単独で 30%含まれている ODF,極点図

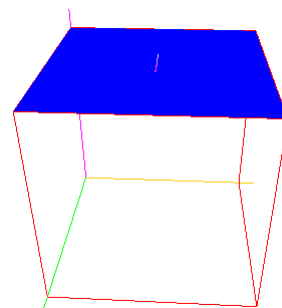
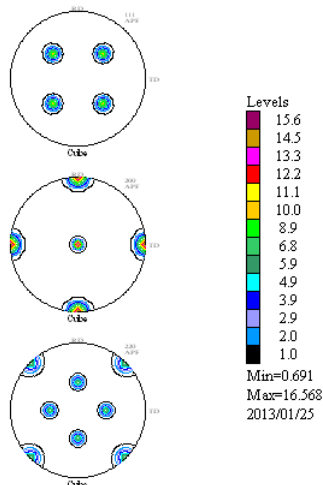
ODFMax 方位密度、極点図 Max 極密度が一致しない。最大値が主方位とは限らない

Cube 方位{001}<100> 30%

Max=128.67

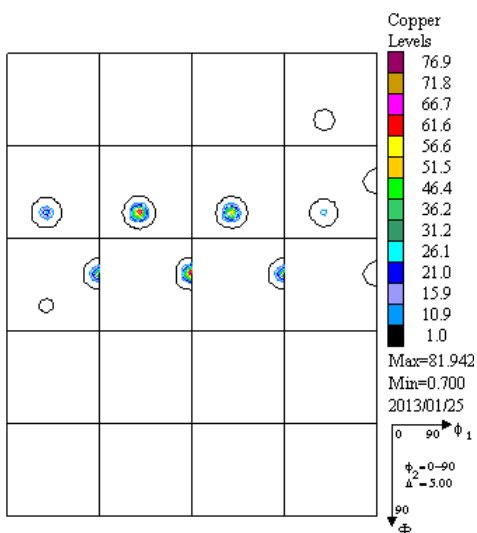


Max=16.57

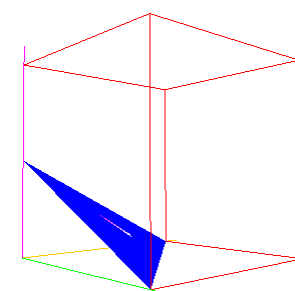
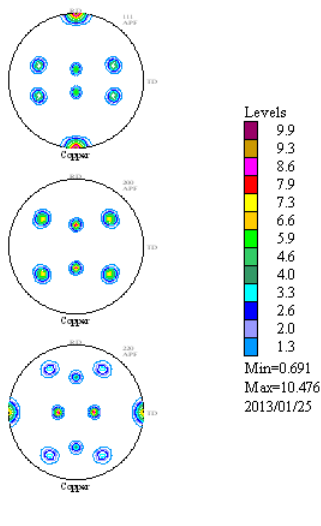


Copper{112}<-1-11> 30%

Max=81.94

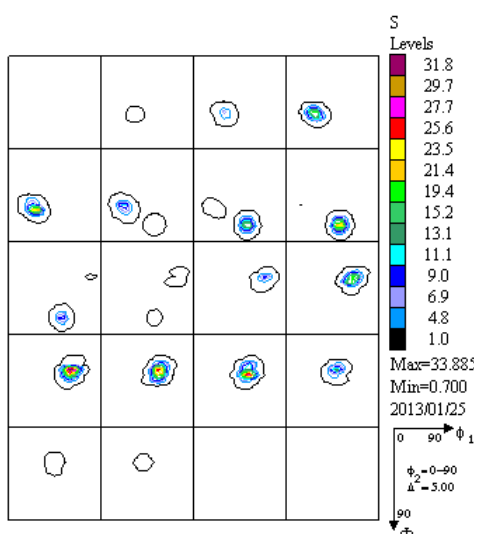


Max=10.48

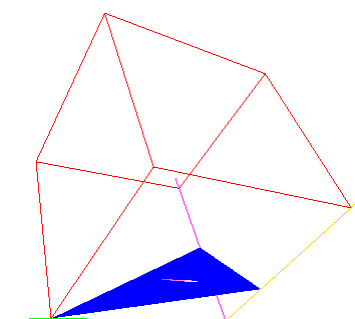
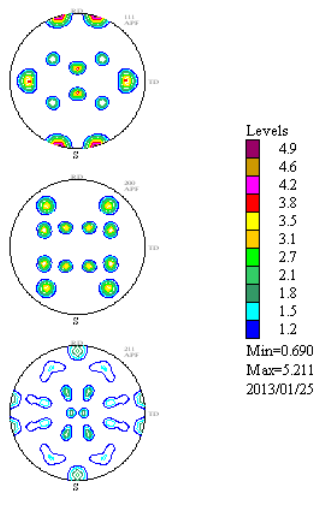


S 方位{132}<6-43> 30%

Max=33.89



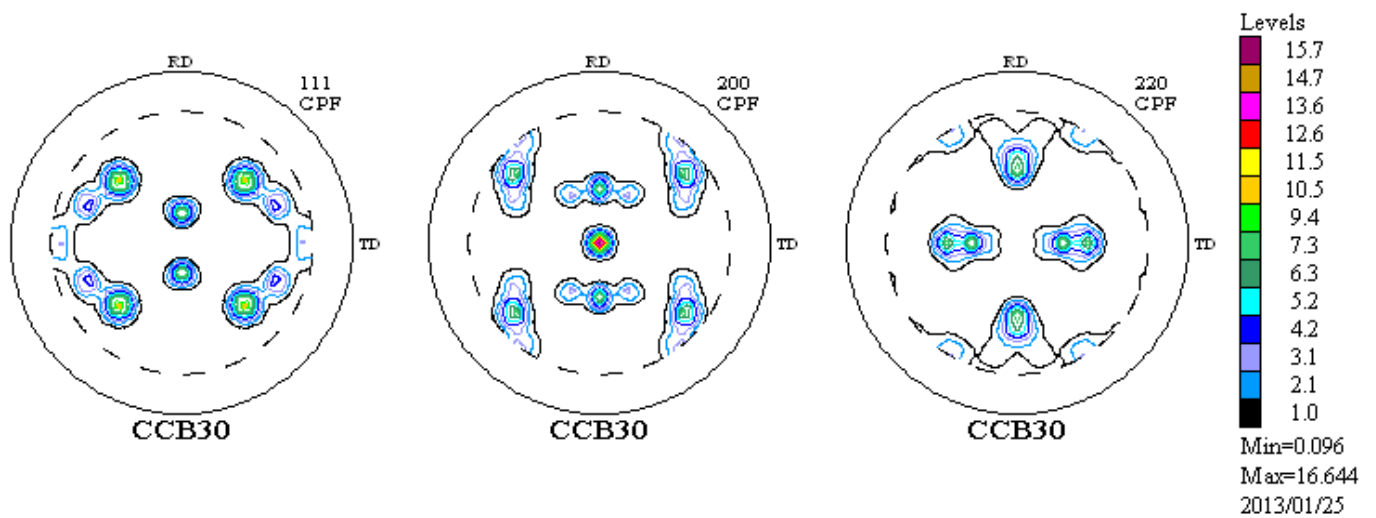
Max=5.21



ODFもMax方位はCube>Copper>Sで最大値が主方位ではありません。

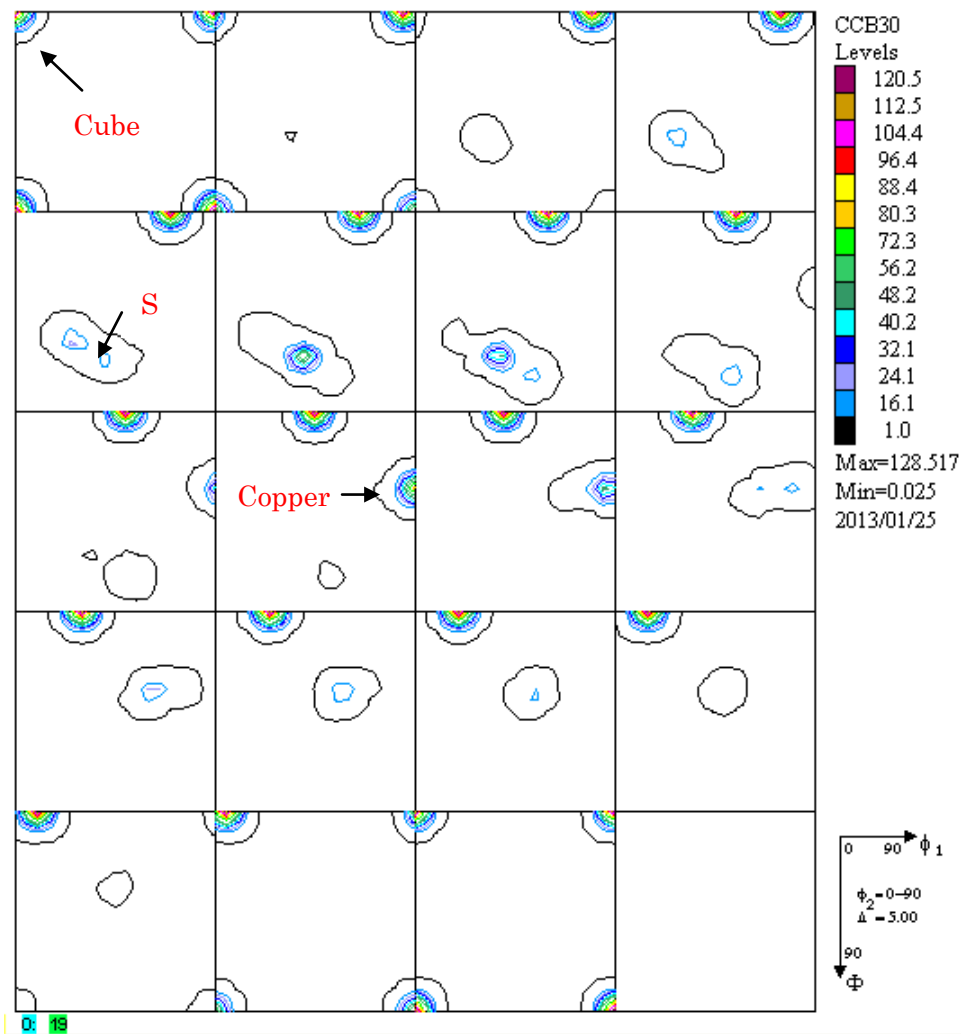
結晶方位の定量 (Volume Fraction)

Cube, Copper, S方位がそれぞれ30%含まれている極点図を反射極点図で測定



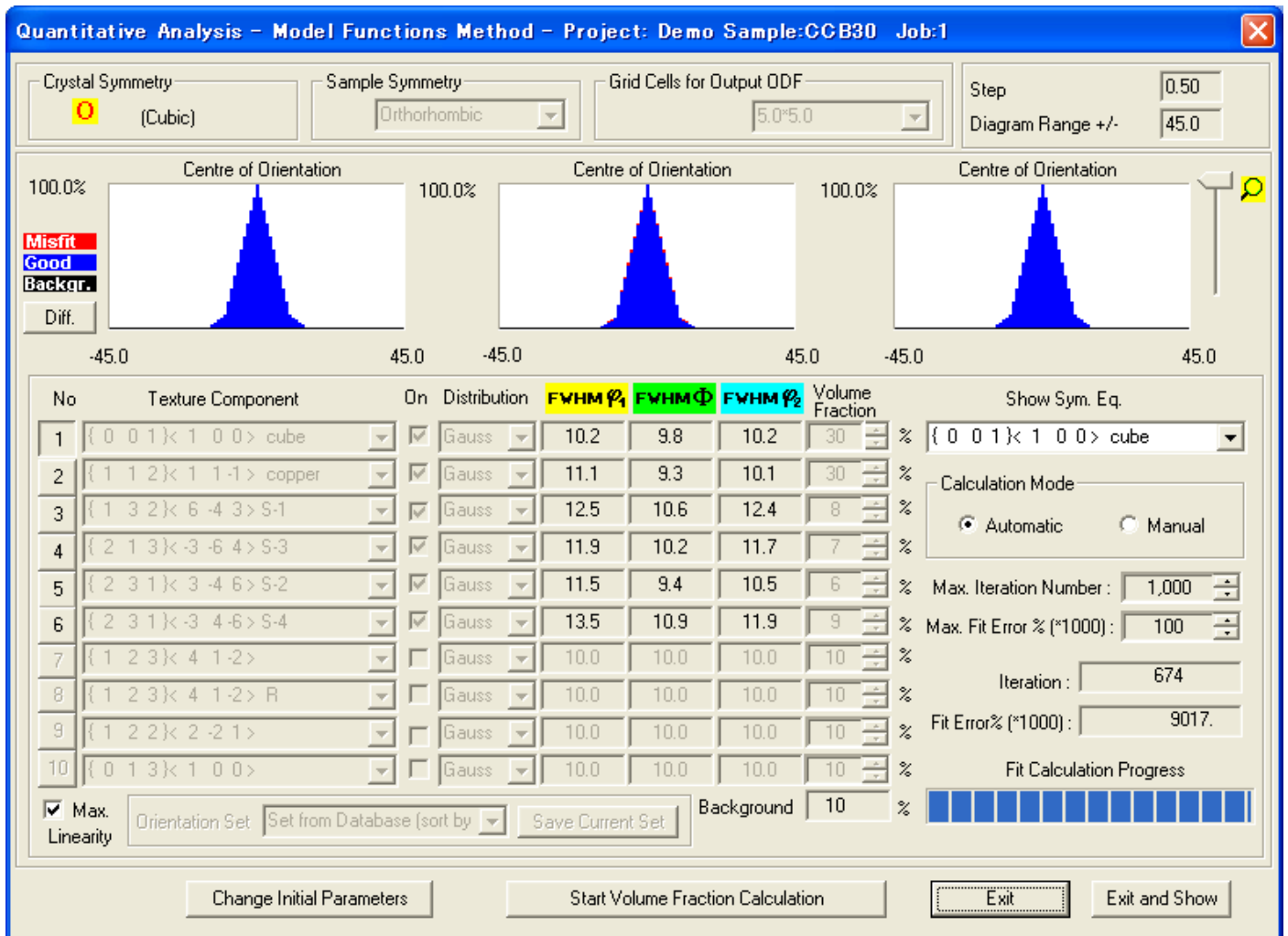
この極点図から結晶方位の決定は難しい。更に方位の定量は困難です。

ODF解析する。(結晶方位は決まるが、その大小関係は難しい)



ODFもMax方位はCube > Copper > Sで最大値が主方位ではありません。

VolumeFraction

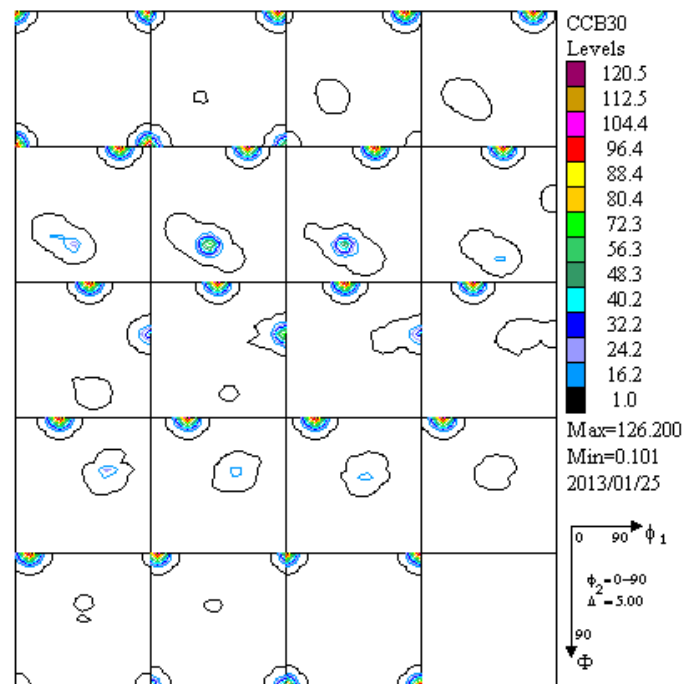
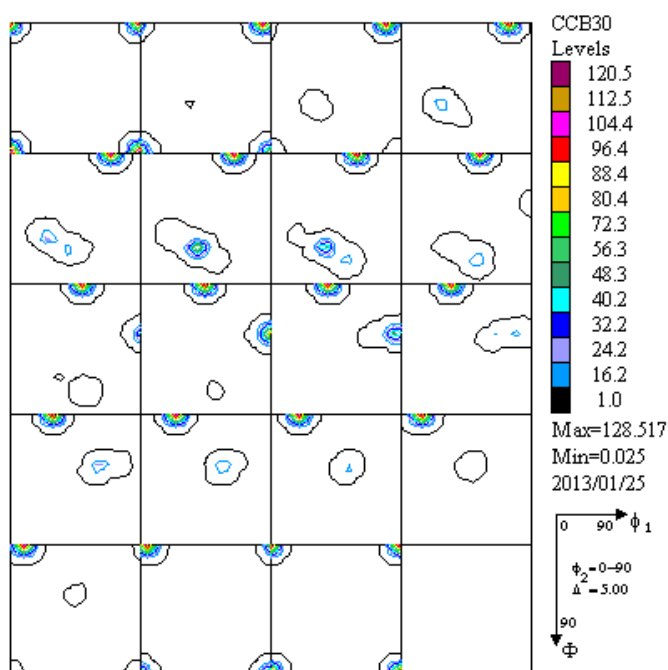


Cube30%,Copper30%,S30%が得られる。

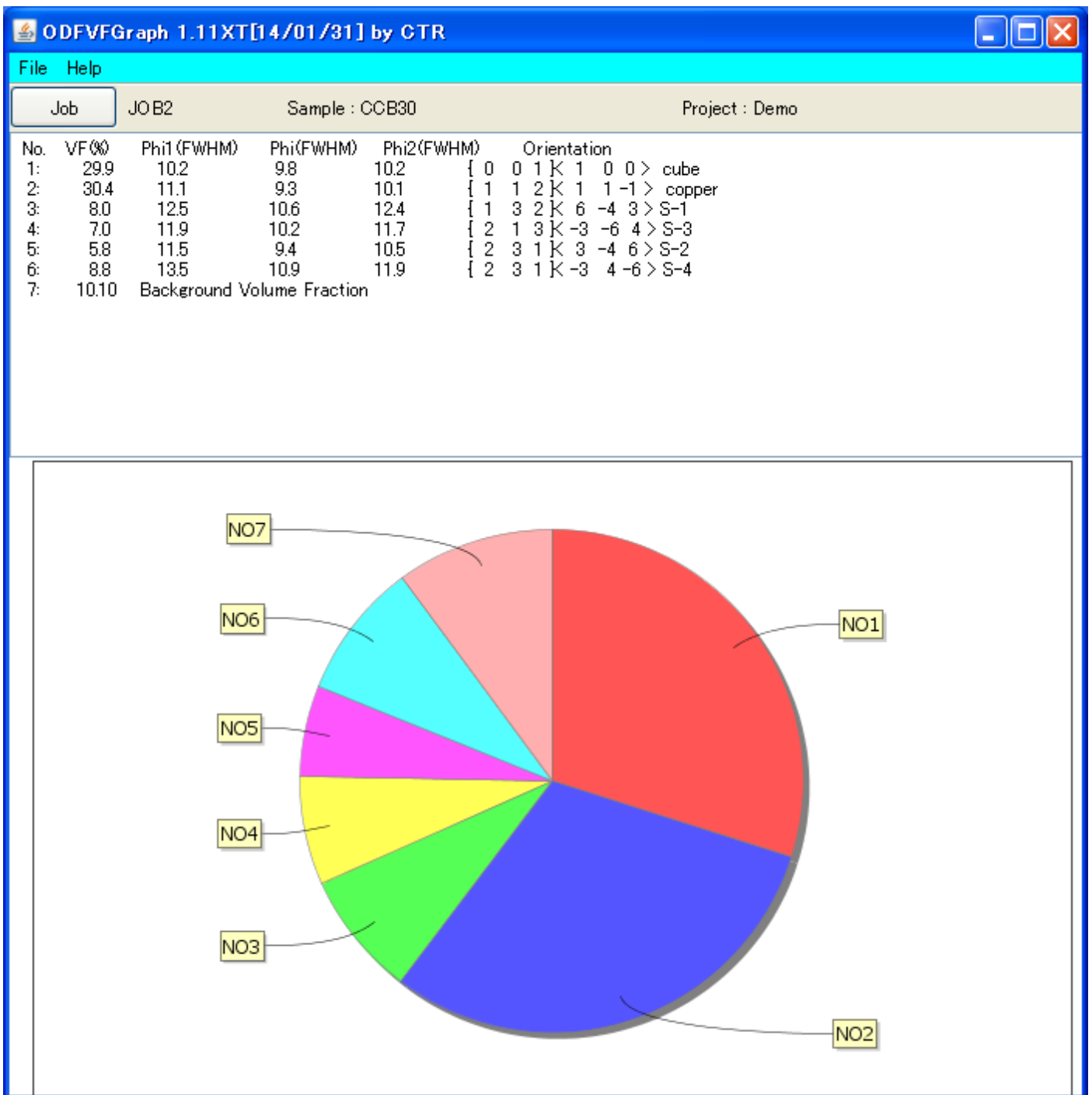
結晶方位の決定は自動的で、定量値は数回繰り返すことでエラーが安定する。

入力極点図から計算した ODF 図

VolumeFraction から計算した ODF 図



更にV o l u e m F r a c t i o nを表示



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

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

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}<uvw>	Euler Angles		ODF (Maximum at Exact Position)	Multiplicity (m)
	{ $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ }	{ α, β, γ }		
Bs, {110}<112>	{35.26 deg, 45 deg, 0 deg}	{54.74 deg, 45 deg, 0 deg}	130.95	2
Copper, {112}<111>	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2
S {123}<634>	{58.98 deg, 36.7 deg, 63.44 deg}	{31.02 deg, 36.7 deg, 26.57 deg}	56.89	1
Goss, {110}<001>	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
Cube, {001}<100>	{ $\varphi_1 + \varphi_2 = 0$ 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}<110>	{ $\varphi_1 + \varphi_2 = 45$ deg, 135 deg, $\Phi = 0$ deg}	{ $\alpha + \gamma = 45$ deg, 135 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated Goss, {110}<011>	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
{111}<112>	{90 deg, 54.75 deg, 45 deg}	{0 deg, 54.74 deg, 45 deg}	130.95	2
{112}<110>	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2

1078—VOLUME 33A, MARCH 2004

METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A

{hkl}<uvw>別に同一 Volume Fraction でも ODF 値が異なることが示されています。

極点図から、極点図データ処理と ODF 解析を行い、測定エラー評価や、ODF 図の解析、逆極点図の解析が試用出来る CDROM を提供致します (試用期限の設定があります)

HelperTex サイトから請求して下さい。

2016/04/07

HelperTex Office