

材料の異方性を左右する結晶方位の数値化

2019年06月15日

HelperTex Office

1. 概要

材料の異方性測定として逆極点図測定や極点図測定が行われ、random試料と比較し、規格化が行われた逆極点図や極点図を比較している。

又、極点図からODF解析を行い、2次元データとして各種Fiberで比較が行われています。

しかし、比較する材料が多い場合、図で比較するより数値化すると簡単に比較できます。

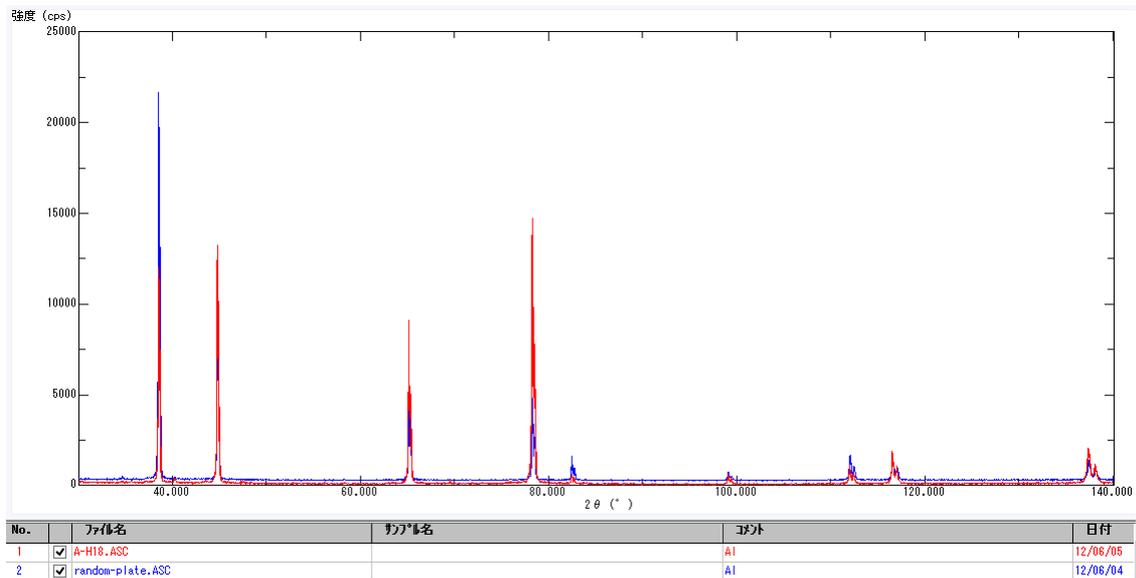
以下に従来の方法とCTRソフトウェアの数値化を説明します。

2. 従来の方法

2. 1 逆極点

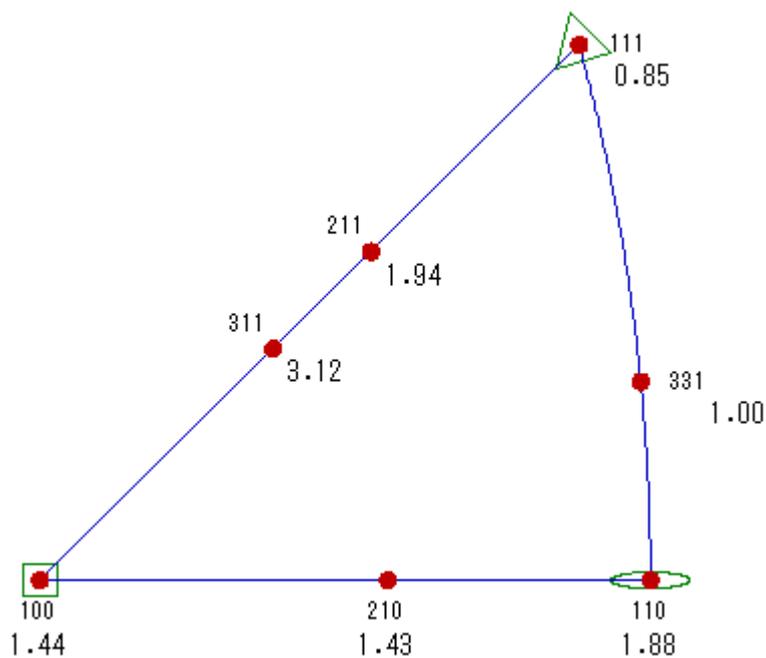
簡易的な方位解析として、試料の面内回転を行い、 θ/θ - S c a n から回折プロファイルを測定
各回折線のピーク面積やピーク強度を計算し r a n d o m 試料との比率を数値化する。

測定データ



逆極点解析ソフトウェアにより r a n d o m 試料との強度比を計算しステレオ三角形上にプロットする。

解析結果

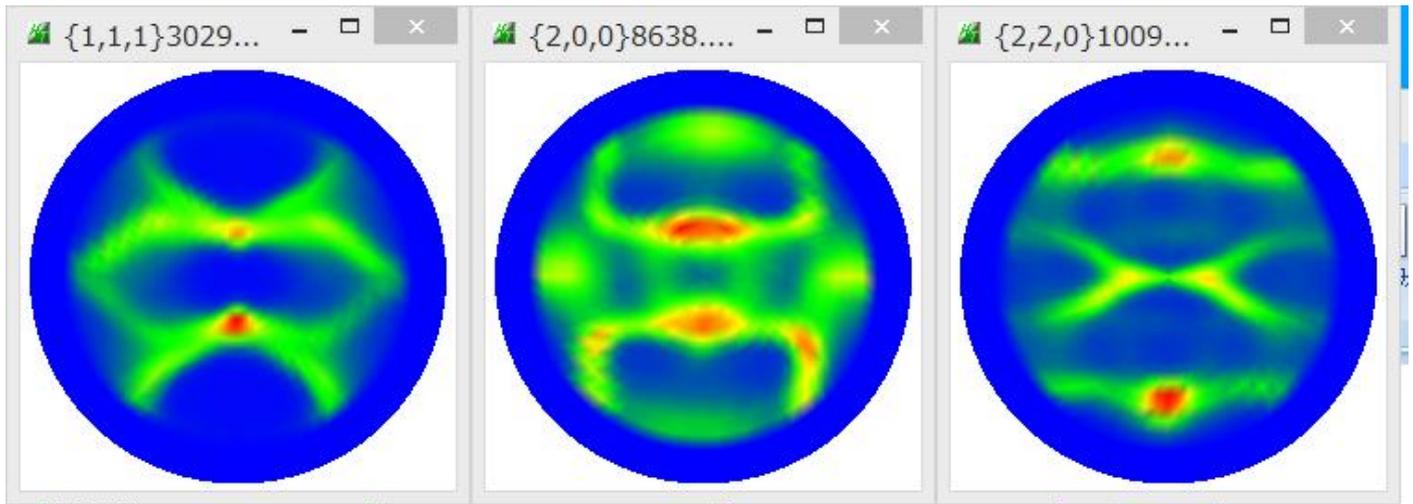


対象データが複数の場合複雑

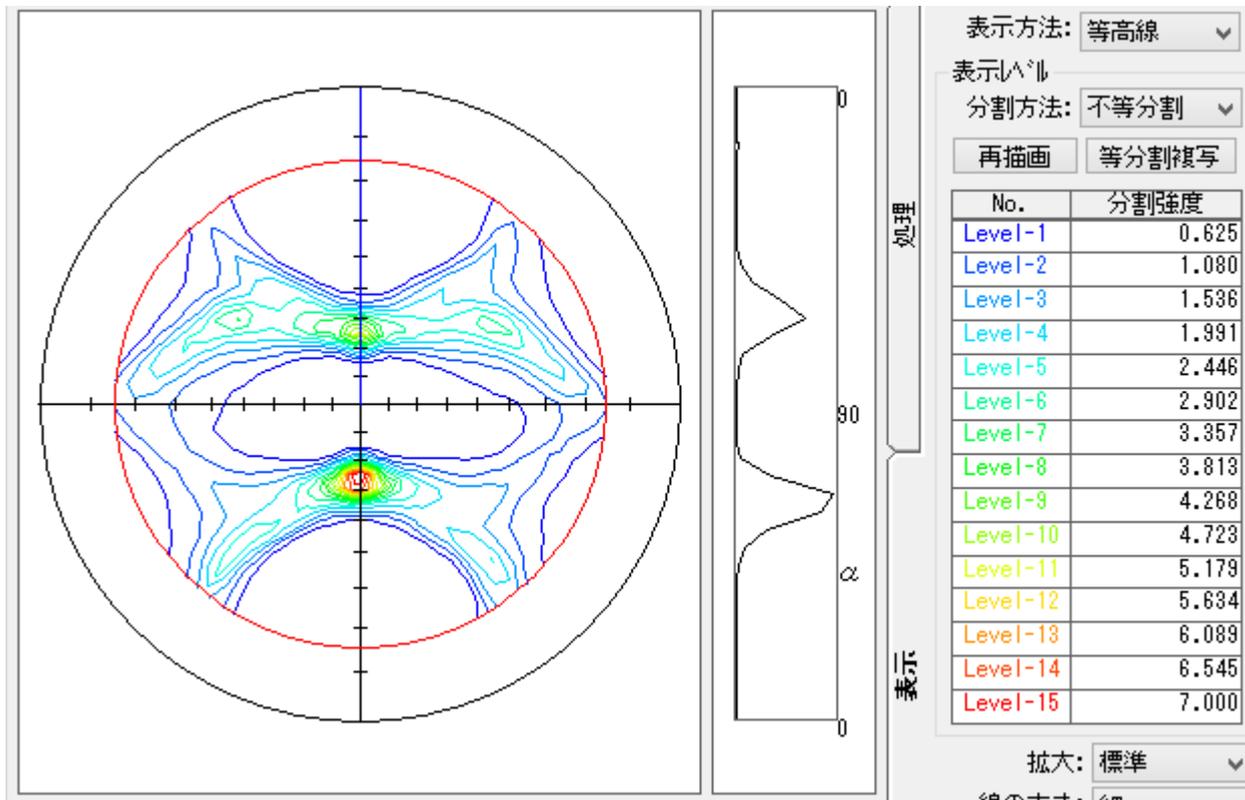
2. 2極点図

極点アタッチメントで極点測定を行い、random試料極点図で規格化する。

測定極点図

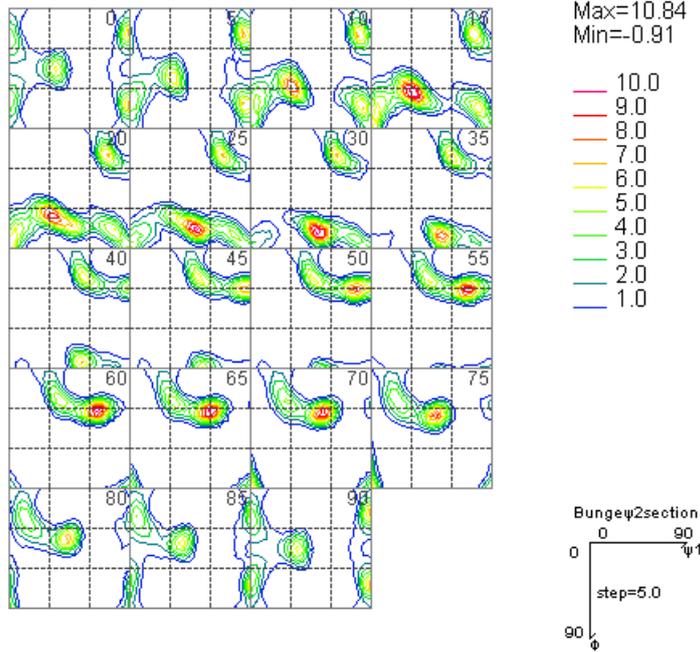


{1 1 1} 極点図を正極点図ソフトウェアで解析

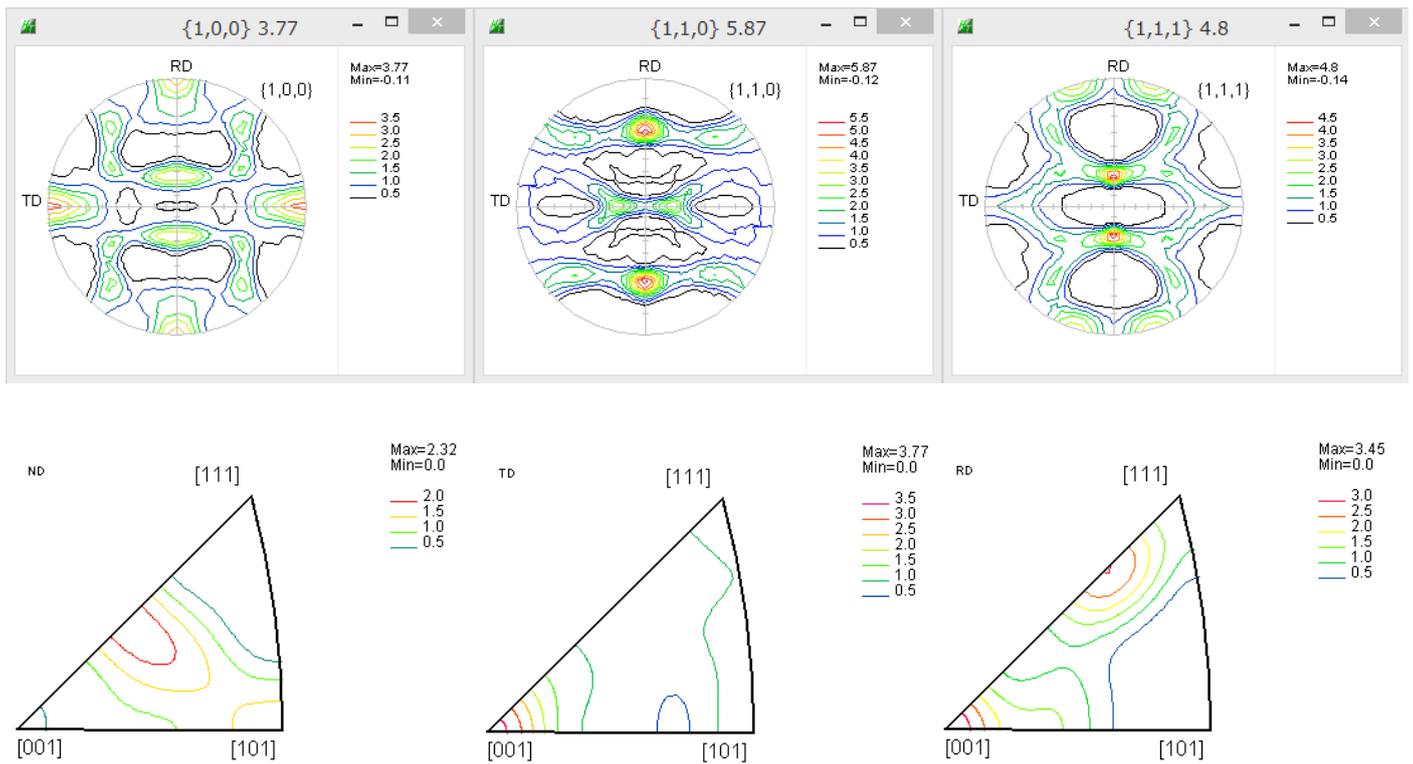


2. 3 ODF解析

複数の極点図からODF解析を行い、完全極点図と逆極点図をCTRソフトウェア表示



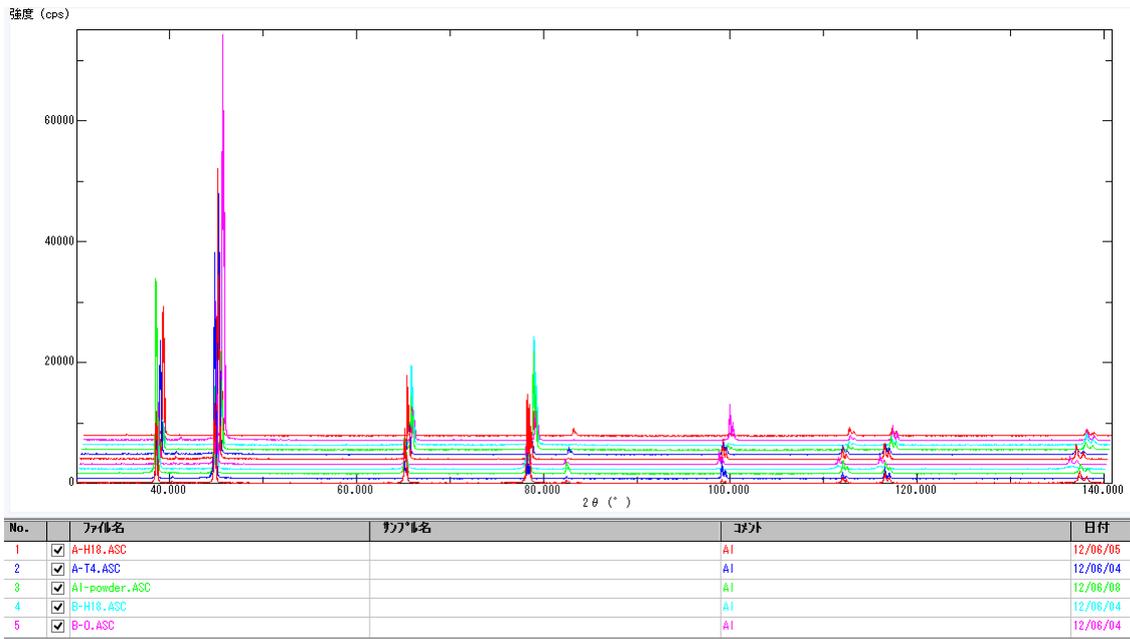
ODFのテキストをExcelで読み込み、Fiber表示が行われている



3. 数値化

3. 1 逆極点

サンプルチェンジャーを用いた多数の θ/θ scanデータ

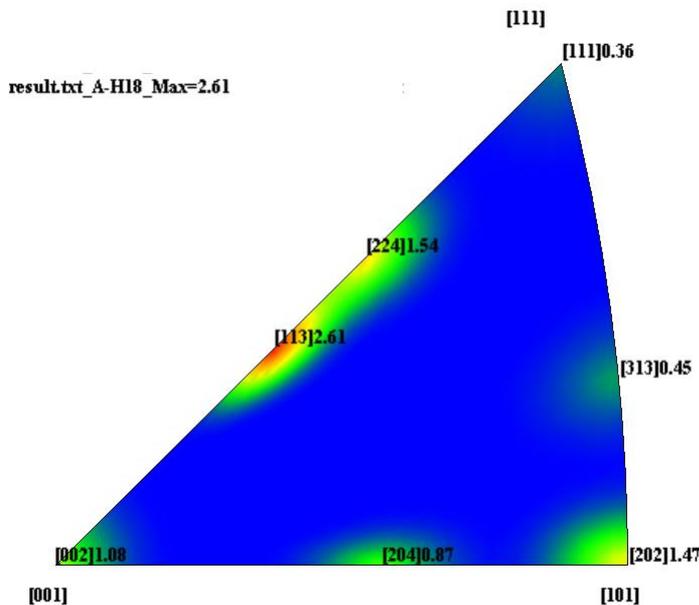


Random 試料との強度や積分データの比率を一括計算し、数値化する。

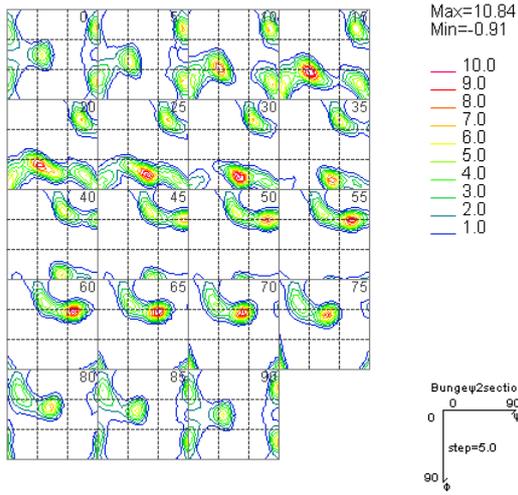
Randommode Standardization BGsmoints=3 Integration

	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
A-H18	0.44	1.078	1.465	2.612	0.287	1.086	0.447	0.869	1.544
A-T4	0.345	3.247	0.51	0.674	0.27	6.319	0.421	0.761	0.085
B-H18	0.459	1.023	1.982	1.664	0.54	0.841	1.084	1.169	1.477
B-O	0.479	2.544	0.577	0.879	0.582	5.148	0.5	0.79	0.825
C-Bach	0.094	2.823	1.464	1.014	0.088	4.804	0.502	0.839	0.888
C-CAL	0.445	2.645	0.962	0.721	0.439	4.264	0.542	0.806	0.492
D-H14	0.175	1.461	1.497	3.0	0.05	2.171	0.416	1.274	0.875
D-H18	0.164	0.71	2.373	3.534	0.048	0.778	0.328	0.752	1.462
D-O	0.021	3.838	0.588	0.762	0.094	6.682	0.218	0.593	0.476

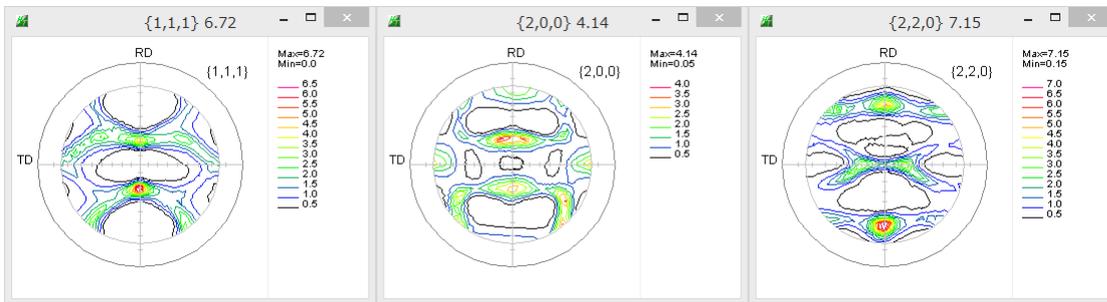
数値化後の逆極点図表示



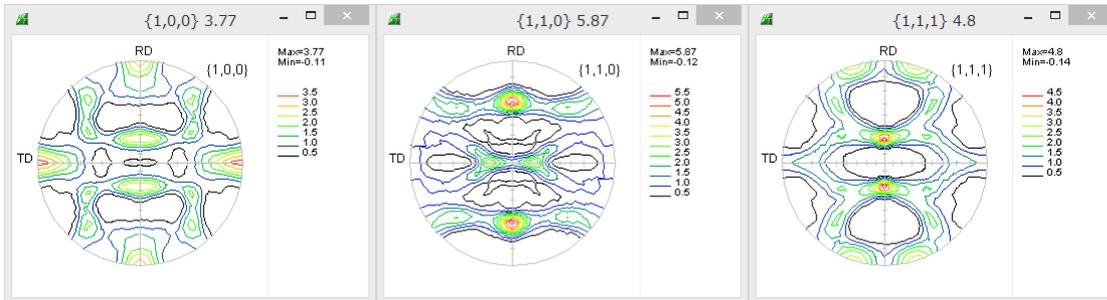
3. 2 ODF 解析



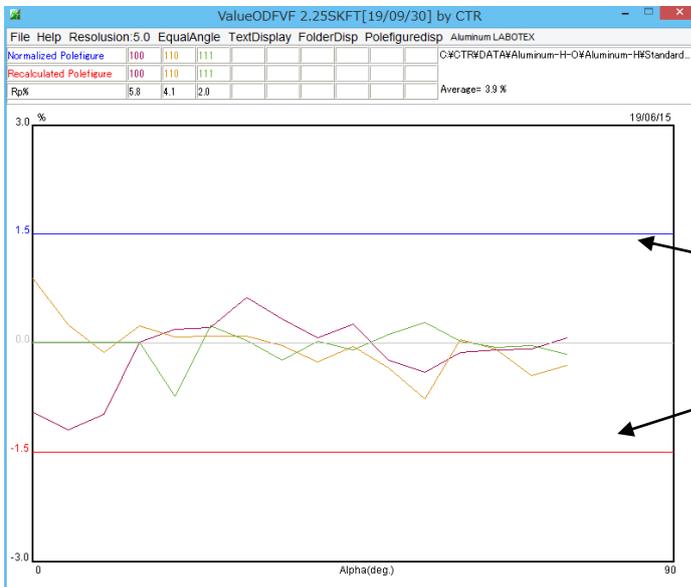
入力極点図



再計算極点図



3. 2. 1 入力極点図と再計算極点図から、入力データの信頼性を Rp% で計算



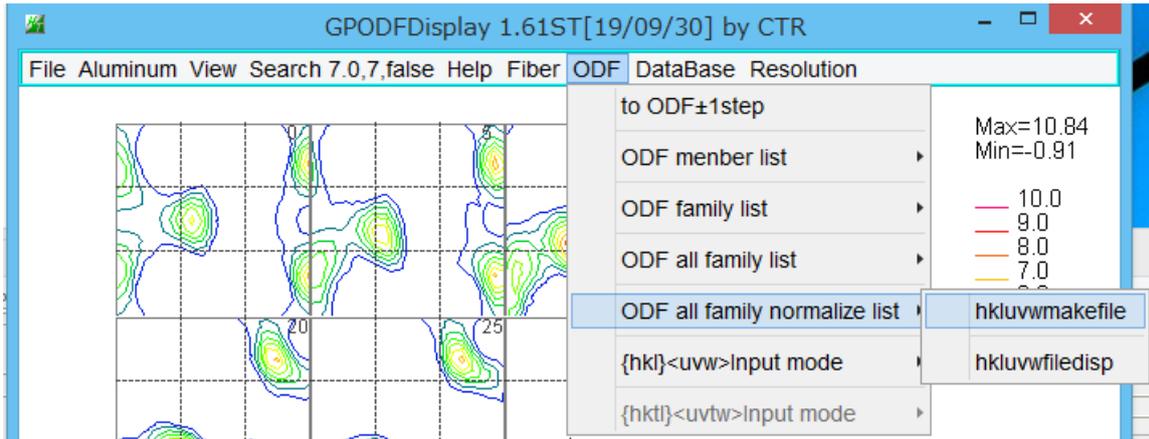
Normalized Polefigure	100	110	111
Recalculated Polefigure	100	110	111
Rp%	5.8	4.1	2.0

Average= 3.9 %

Rp%プロファイルが±1.5%以内
信頼性の高い結果が得られています

3. 2. 2 ODF 図から各種結晶方位の数値化とグラフ化

GPODFDisplay ソフトウェアでは設定(変更追加可能)されている方位の数値化が可能

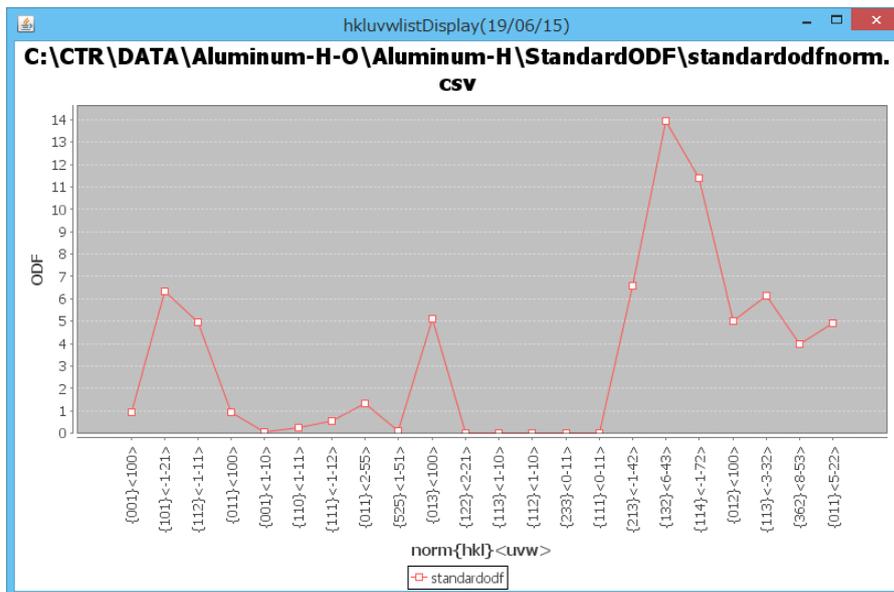


数値化

```

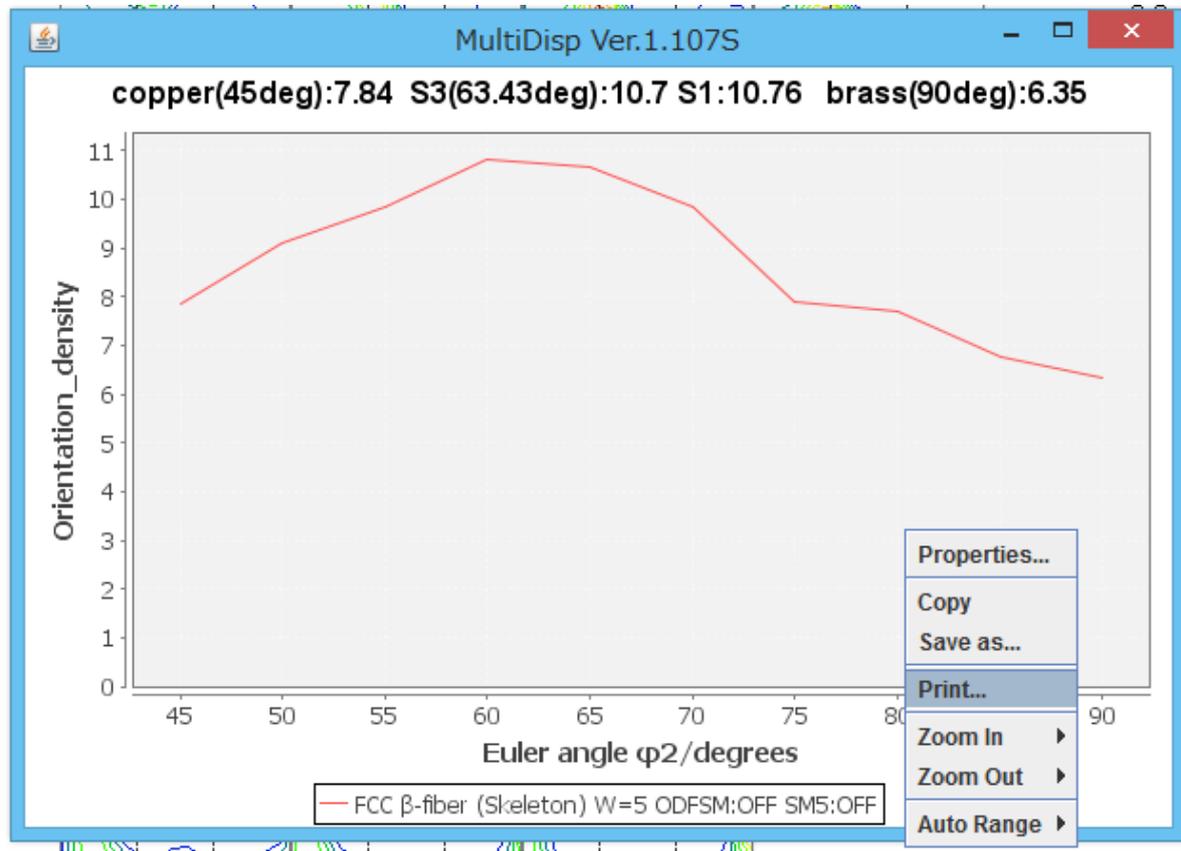
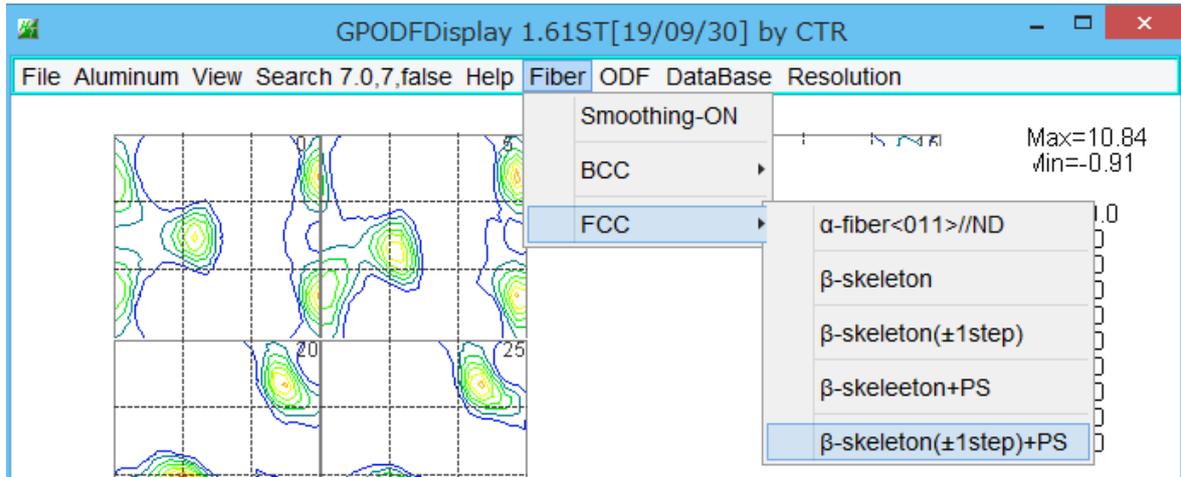
norm{hkl}<uvw>,standardodf
{001}<100>,0.935
{101}<-1-21>,6.35
{112}<-1-11>,4.95
{011}<100>,0.915
{001}<1-10>,0.06
{110}<1-11>,0.25
{111}<-1-12>,0.56
{011}<2-55>,1.34
{525}<1-51>,0.08
{013}<100>,5.13
{122}<2-21>,0.0
{113}<1-10>,0.0
{112}<1-10>,0.0
{233}<0-11>,0.0
{111}<0-11>,0.0
{213}<-1-42>,6.58
{132}<6-43>,13.94
{114}<-1-72>,11.38
{012}<100>,5.02
{113}<-3-32>,6.14
{362}<8-53>,3.96
{011}<5-22>,4.89
    
```

グラフ化



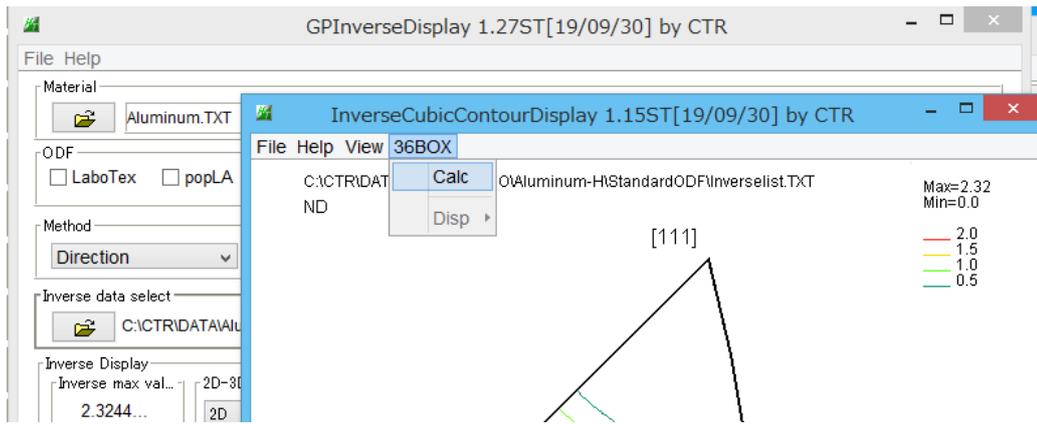
3. 2. 3 ODF 図から Fiber 解析

GPODFDisplay では各種 Fiber の数値化により Fiber 図を表示

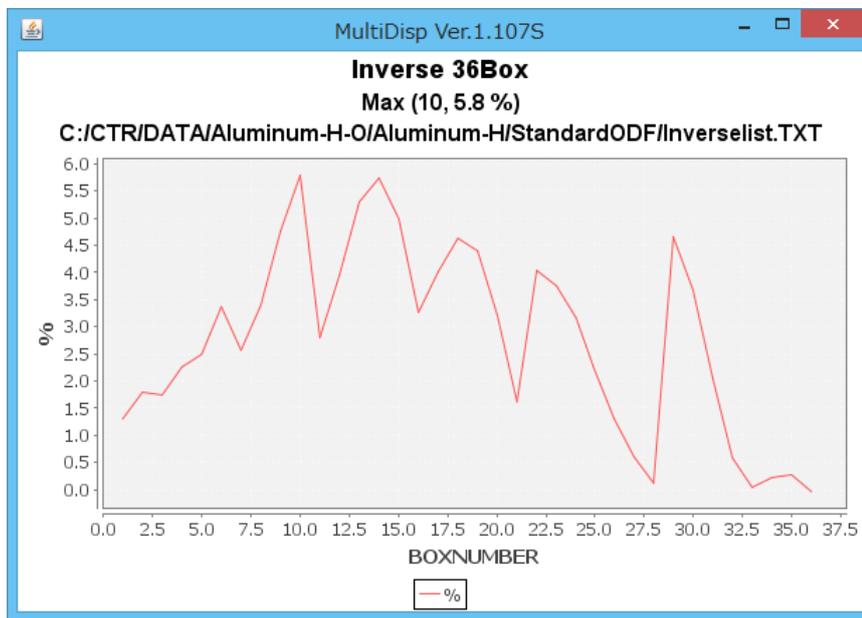


3. 2. 4 逆極点図の数値化

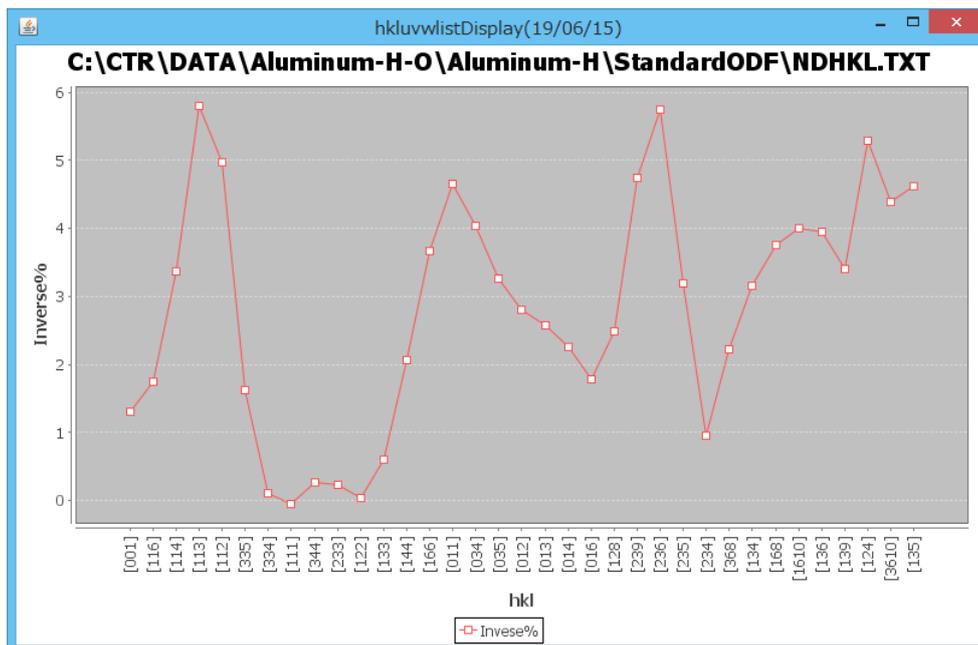
Vector法の解析では方位解析として方位を36Boxに分割して扱うことがあります。この36BoxをODF解析の逆極点図に利用して数値化を行います。



36Boxで表示



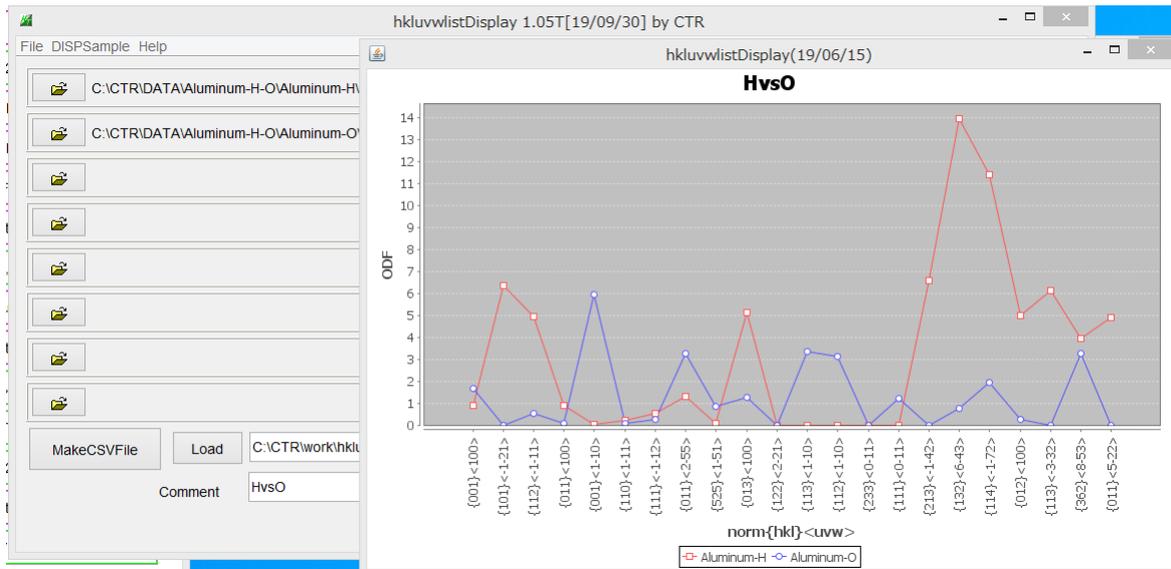
36Boxを方位として表示



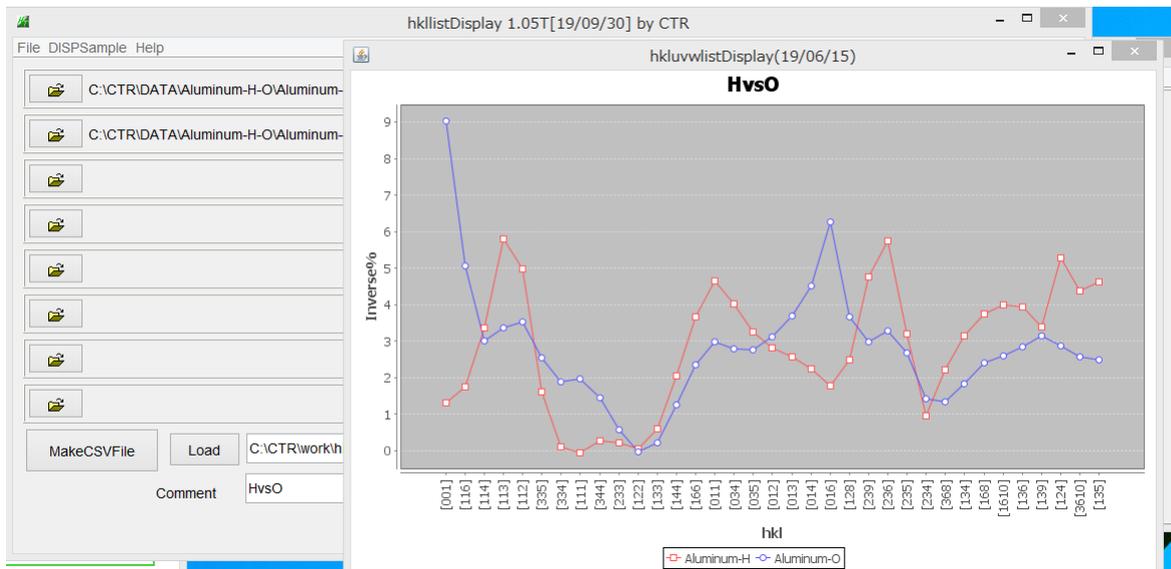
3. 2. 5 複数のODF結果を比較する

最大8個の方角解析結果を比較

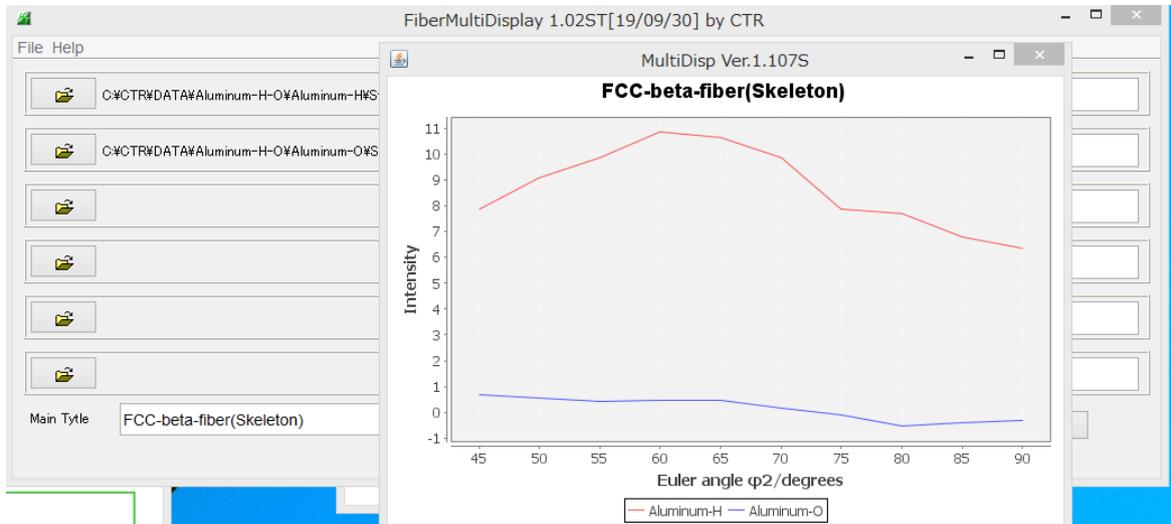
ODF図比較



逆極点図比較

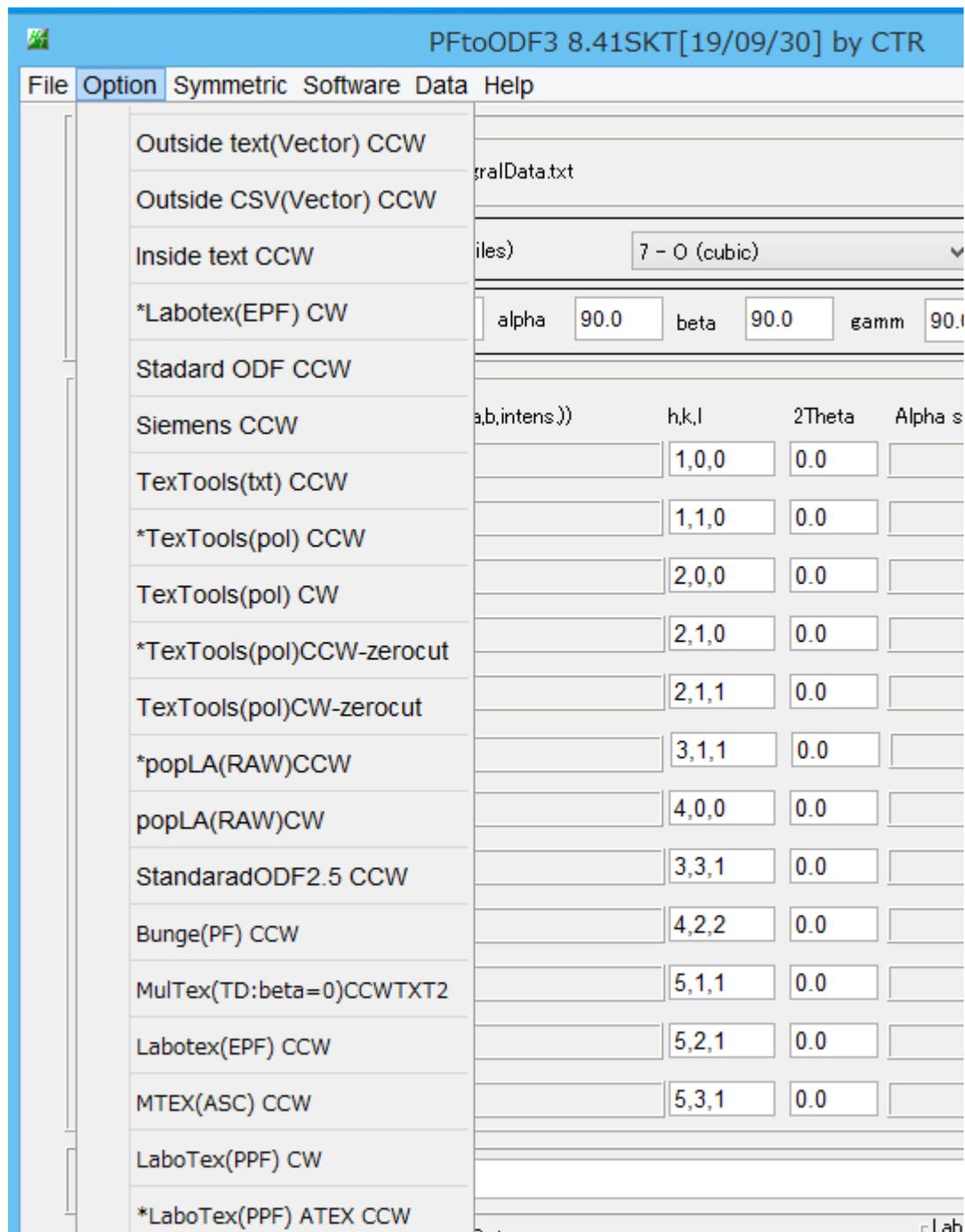


Fiber比較 (最大6個のFiberを比較する)

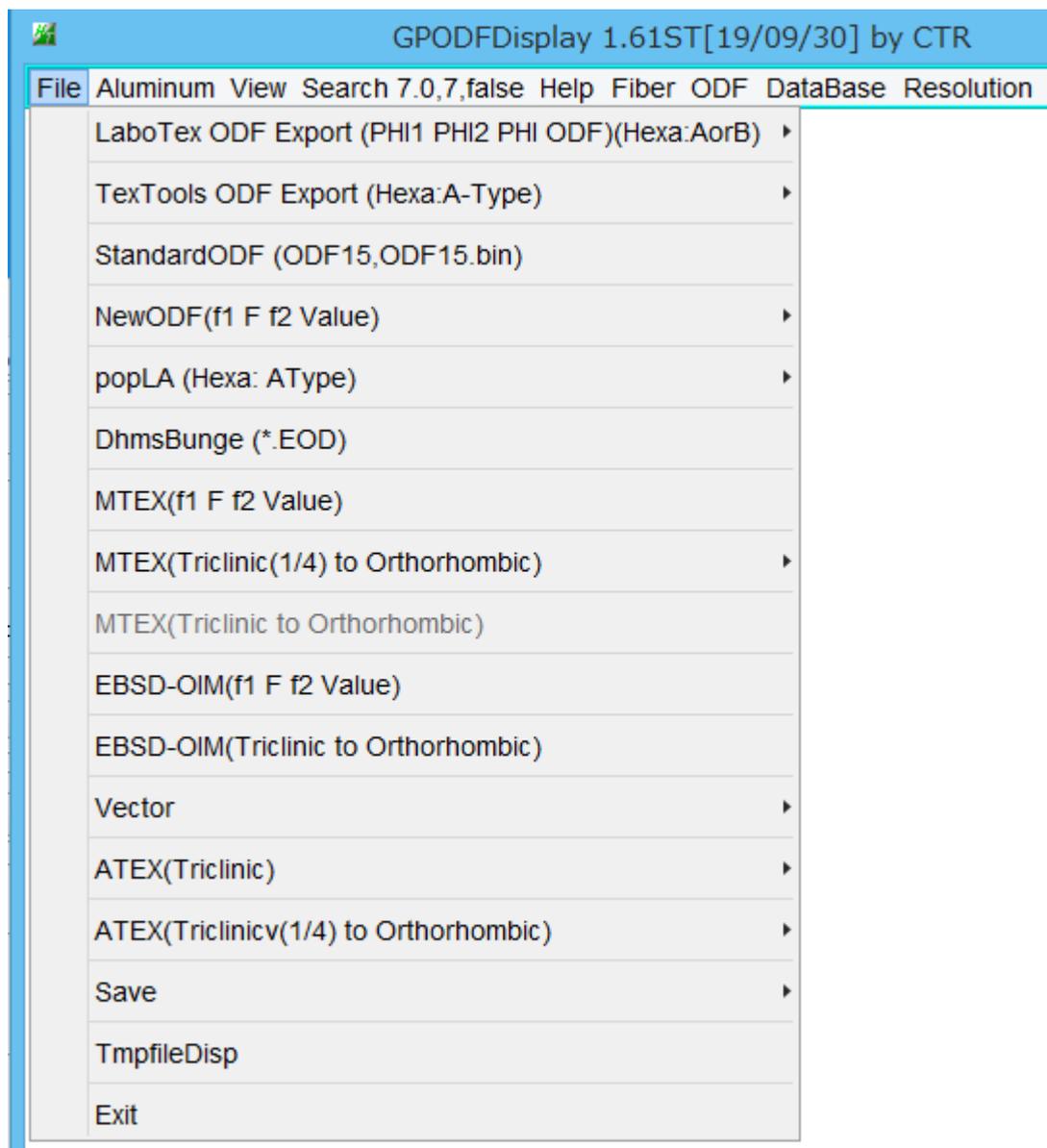


4. 対応しているODF解析ソフトウェア

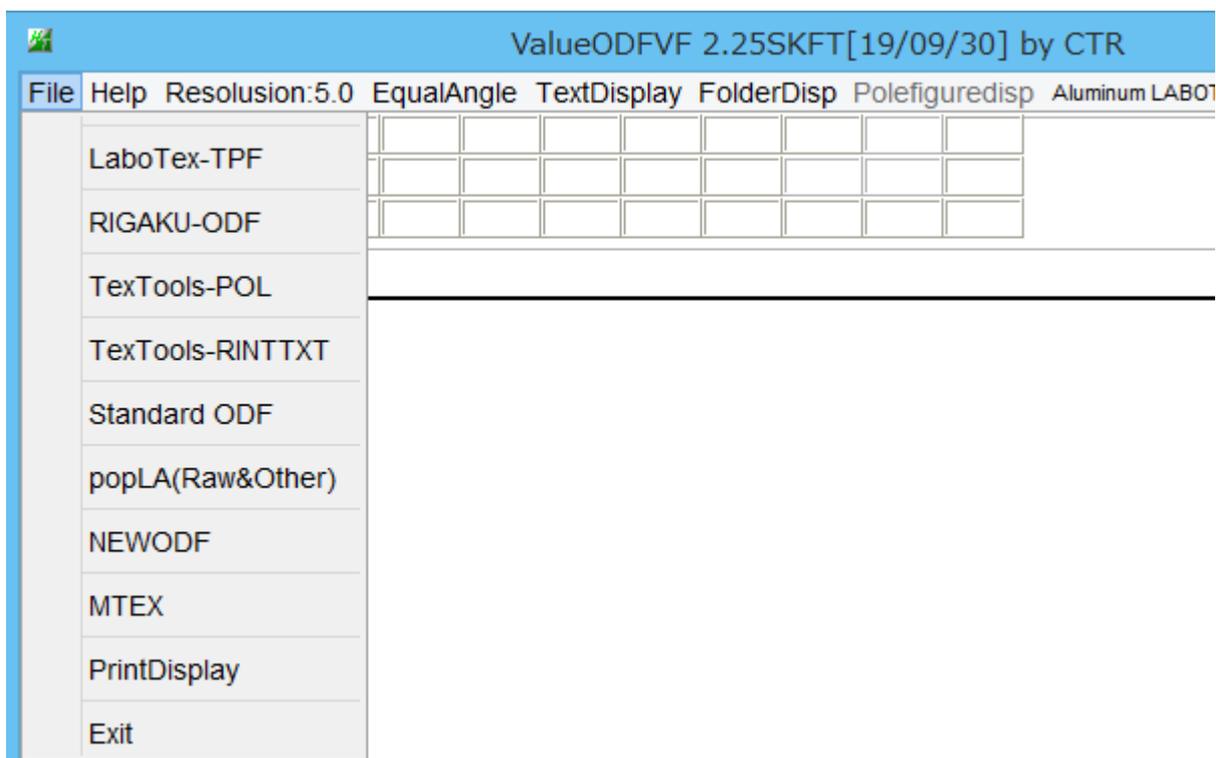
4. 1 ODF入力データ作成



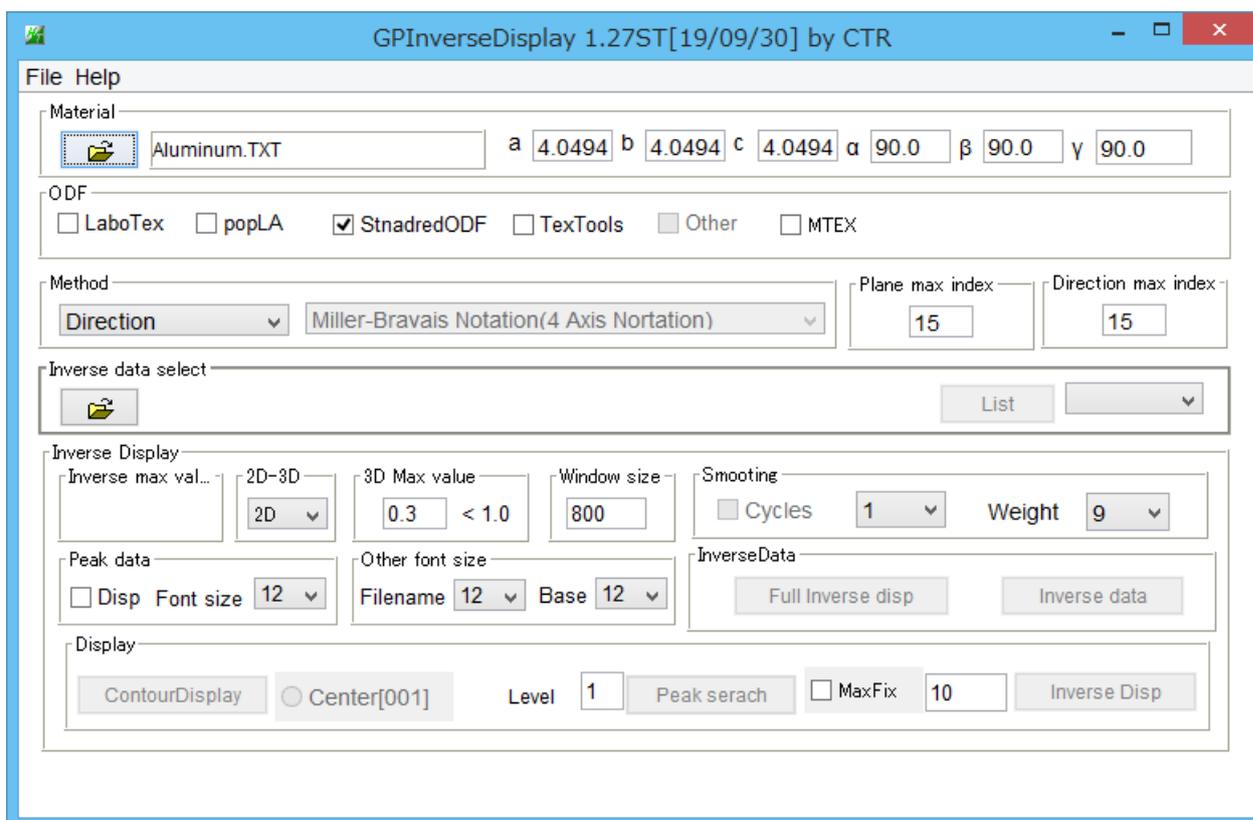
4. 2 解析されたODFファイルの読み込み



4. 3 Error評価 (Rp%)



4. 4 逆極点図計算



まとめ

ソフトウェアは柔軟に出来ています。
機能追加などご用命頂ければ対応致します。