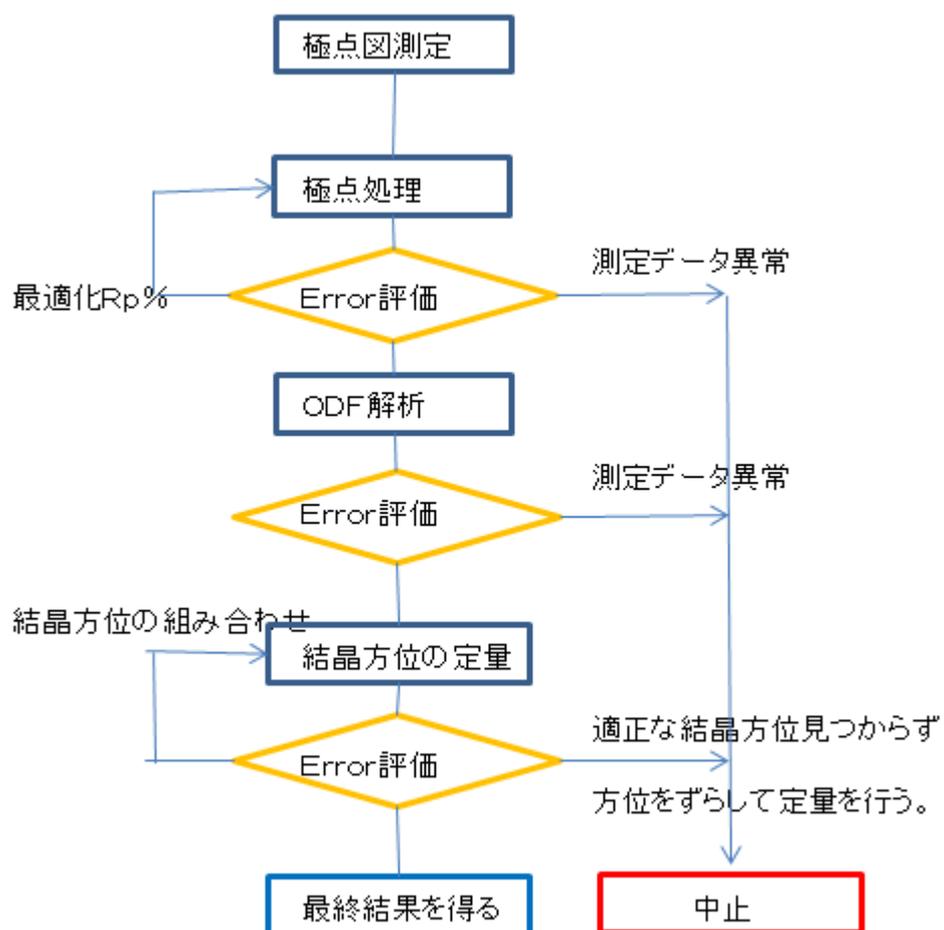


立方晶として登録されている方位のみから

極点図から結晶方位の定量を計算する 2

結晶方位定量のながれ



2021年09月08日

HelperTex Office

1. 概要

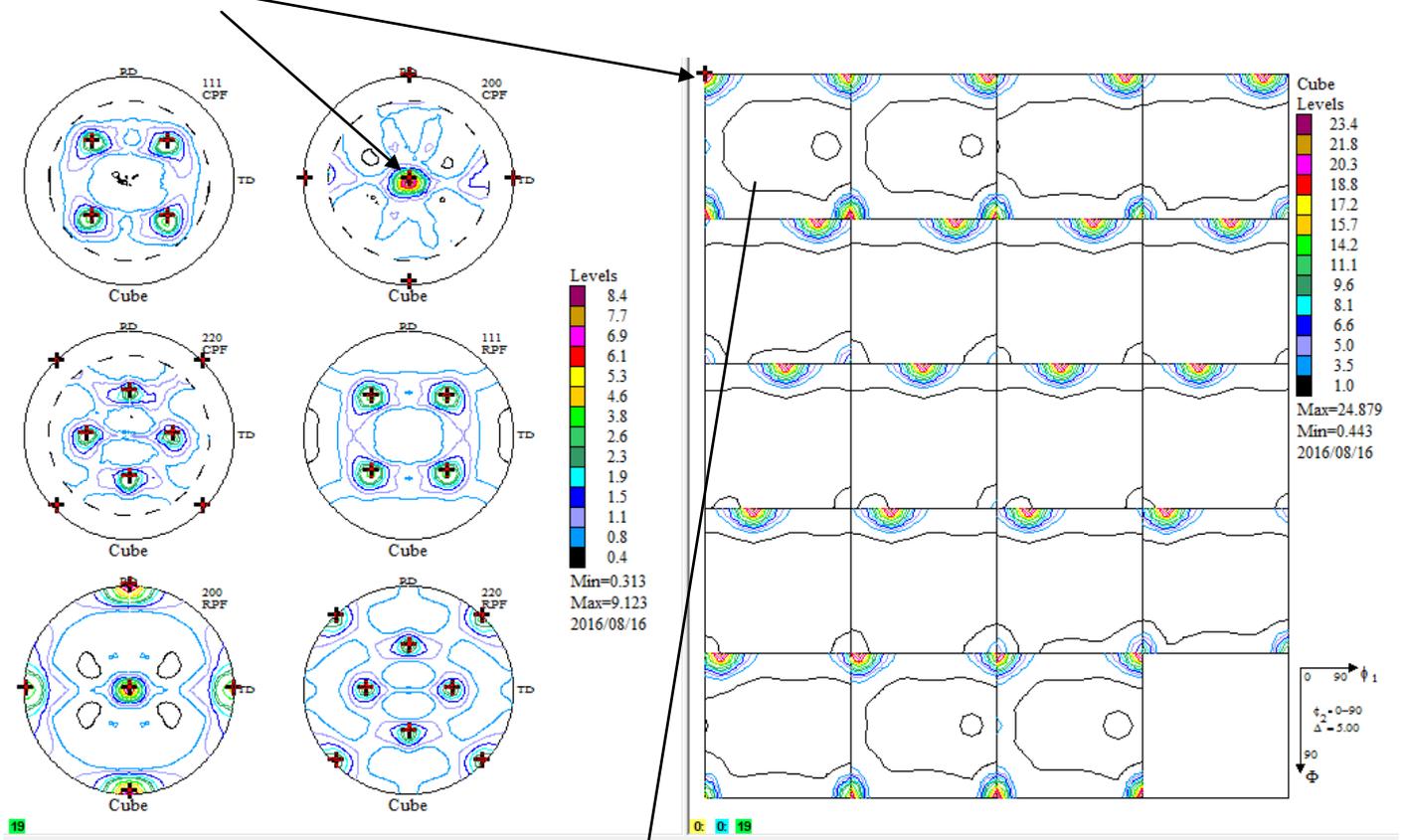
材料の異方性を調べる方法として、極点図からODF解析を行い、VolumeFraction解析から結晶方位の定量が行われている。結晶方位としてCube, Goss, Brass, Copper, Sなどがある。

この様な、標準的な結晶方位からの解析法を紹介します。

VolumeFraction 定量を行う場合、Error 評価が重要です。

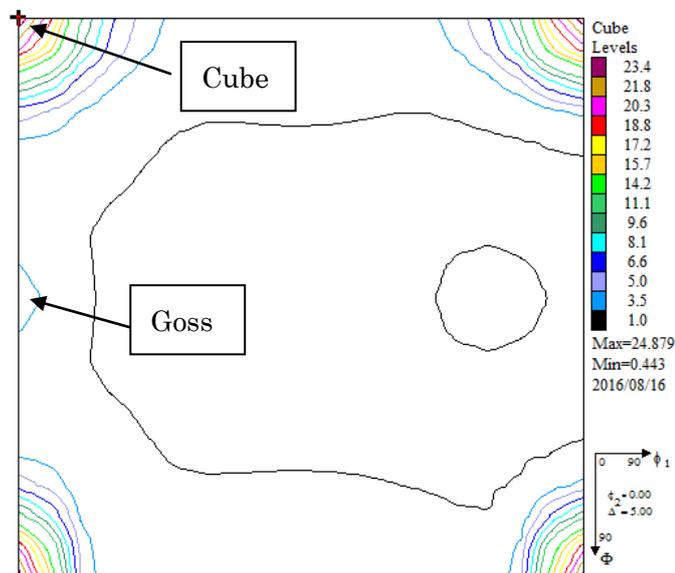
測定データError、VolumeFractionのErrorは把握してください。

+ Cube方位



CPF極点図：1/4 対称入力極点図

RPF極点図：ODF後の再計算極点図



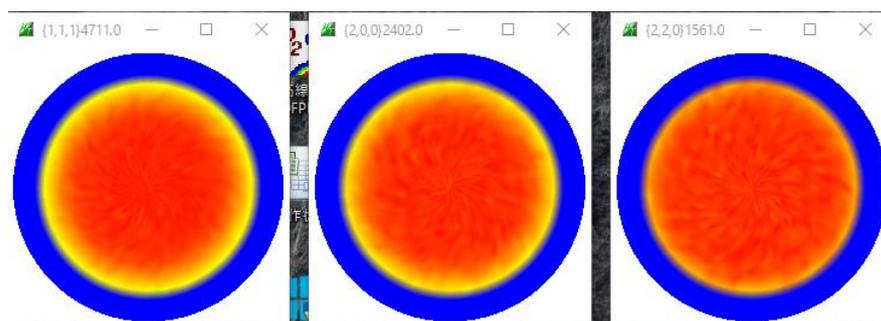
計算に必要なデータ

光学系補正用無配向データ

本文で使用するデータは、粉末アルミニウムを S c h u l z の反射法で測定

C:\¥CTR¥DATA¥Al-powder-random¥

{111},{200},{220}極点図

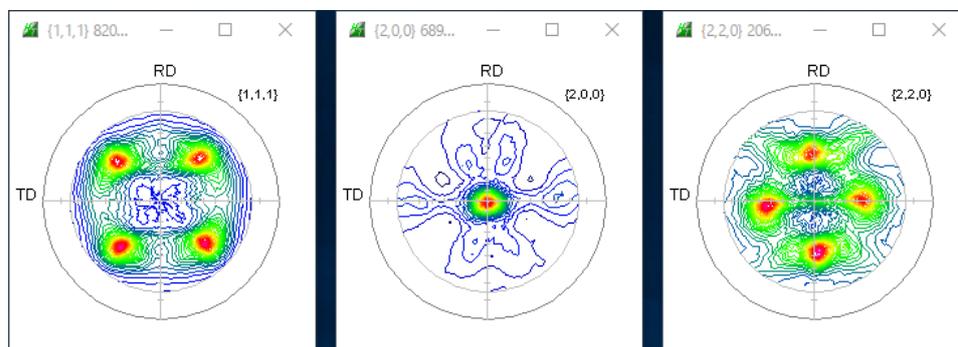


配向データ

厚さ 1 mm の S c h u l z の反射法で測定したデータ

C:\¥CTR¥DATA¥PoleFigure¥

{111},{200},{220}極点図



極点処理と R p % の最適化

ODFPoleFigure1.5 あるいは ODFPoleFigure2 ソフトウェア

ODF 解析ソフトウェア (VolumeFraction を計算する

LaboTex ソフトウェア

Error 評価ソフトウェア

ValueODFVF ソフトウェア

入力極点図の複数の極点図の一部に矛盾があっても、ODF 解析では、矛盾を低減した再計算極点図の結果が得られます。

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

Rp%を評価することで、入力極点図の矛盾が判明します。

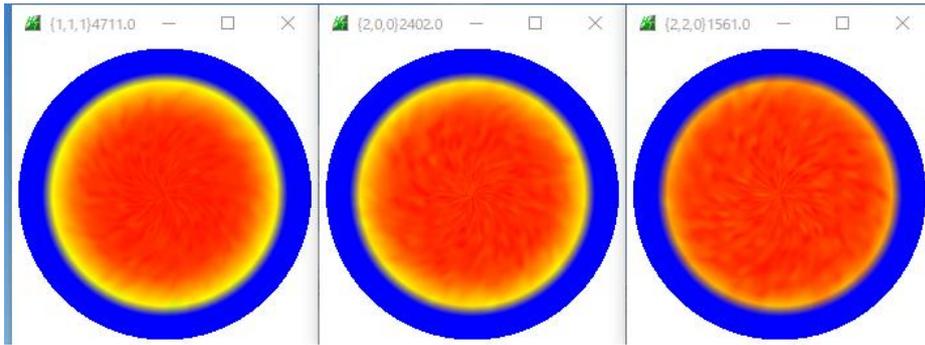
LaboTex 入力データ

PFtoODF3 ソフトウェア

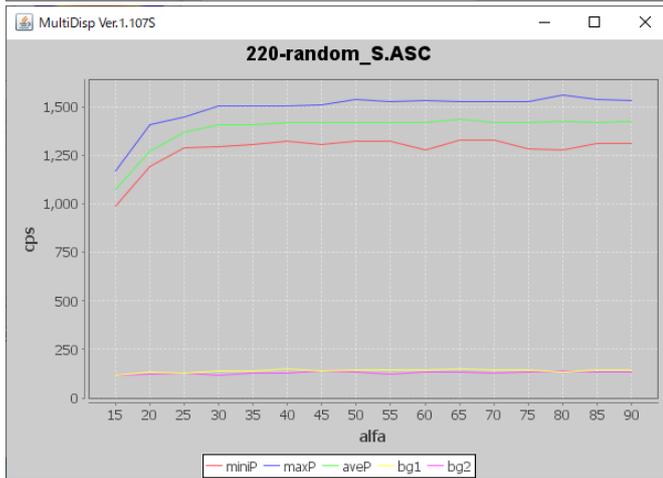
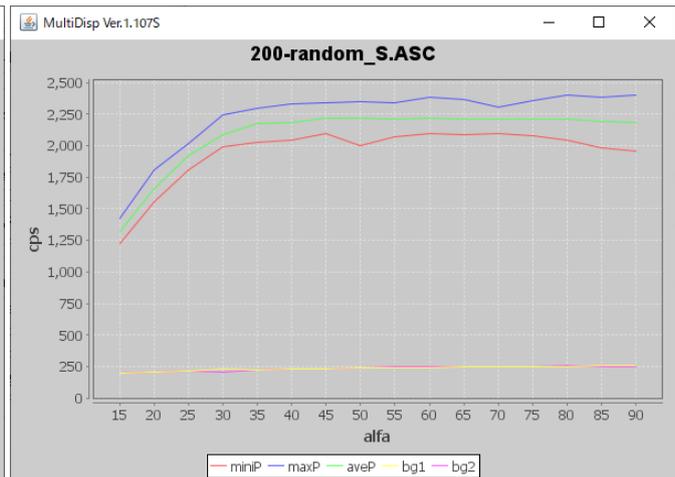
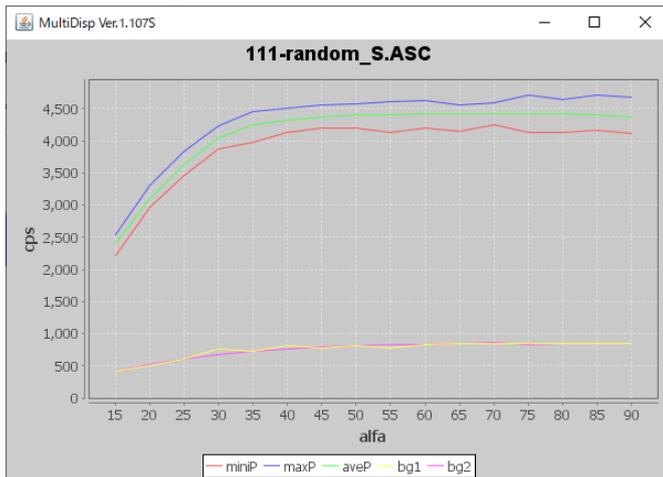
2. 測定データの補正解析(ODFPoleFigure1.5)

2.1 defocus補正データ作成

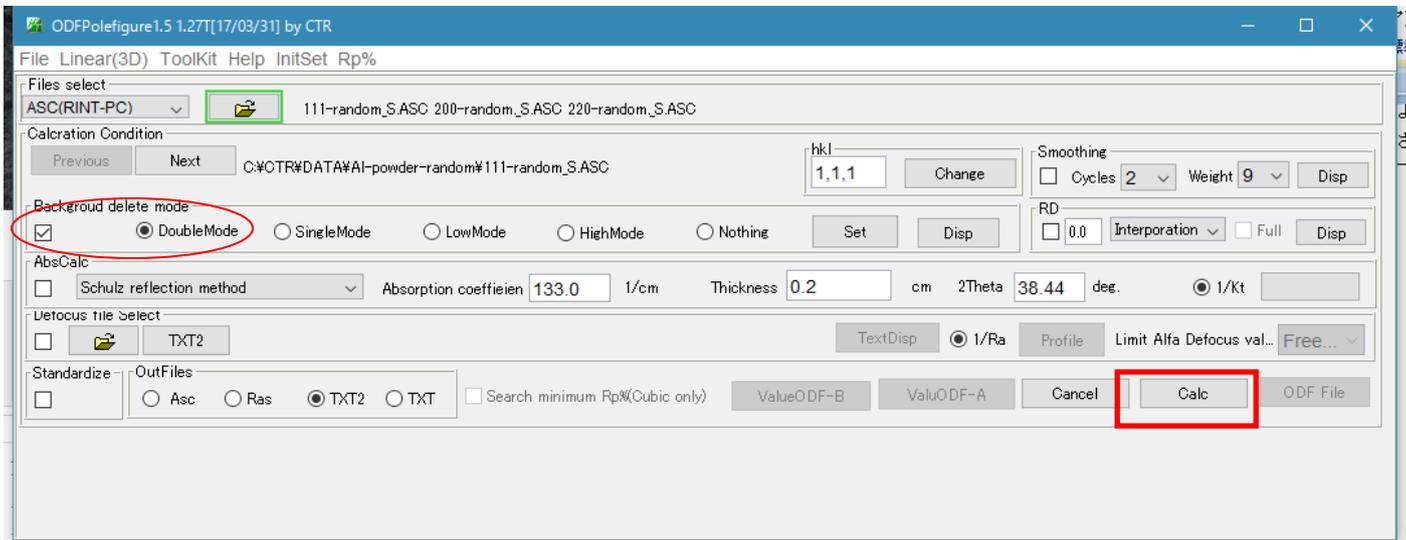
アルミニウム粉末極点データのバックグラウンド削除を行う。



データ確認



バックグラウンドの確認、凸凹している場合の修正は ODFPoleFigure2 ソフトウェアを使う。

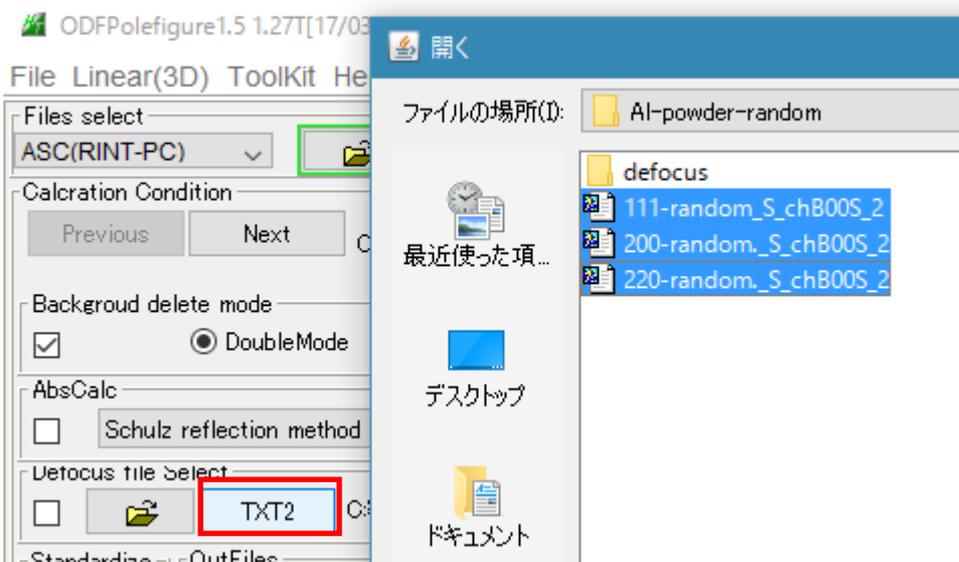


C a l c で TXT2 ファイルが作成される。

> CTR > DATA > Al-powder-random

名前	更新日時	種類
111-random_S_ASC	2016/02/27 15:05	RINT20007ステー
200-random_S_ASC	2016/02/27 15:07	RINT20007ステー
220-random_S_ASC	2016/02/27 15:10	RINT20007ステー
111-random_S_chB0_2.TXT	2021/09/08 16:24	テキスト文書
200-random_S_chB0_2.TXT	2021/09/08 16:24	テキスト文書
220-random_S_chB0_2.TXT	2021/09/08 16:24	テキスト文書

TXT2 データの登録

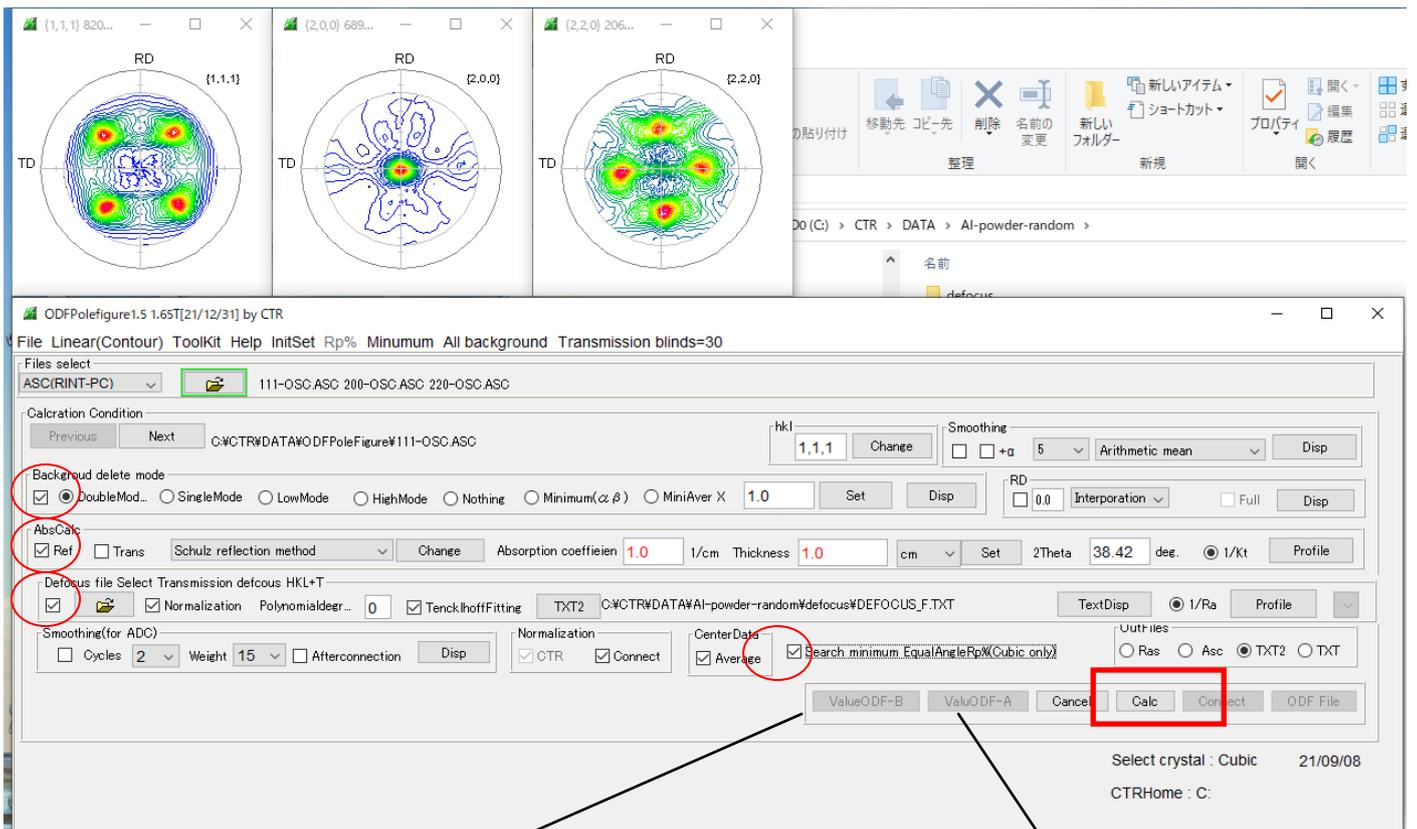


TXT2 を 3 個同時選択で、DEFOCUS テーブルが登録される。



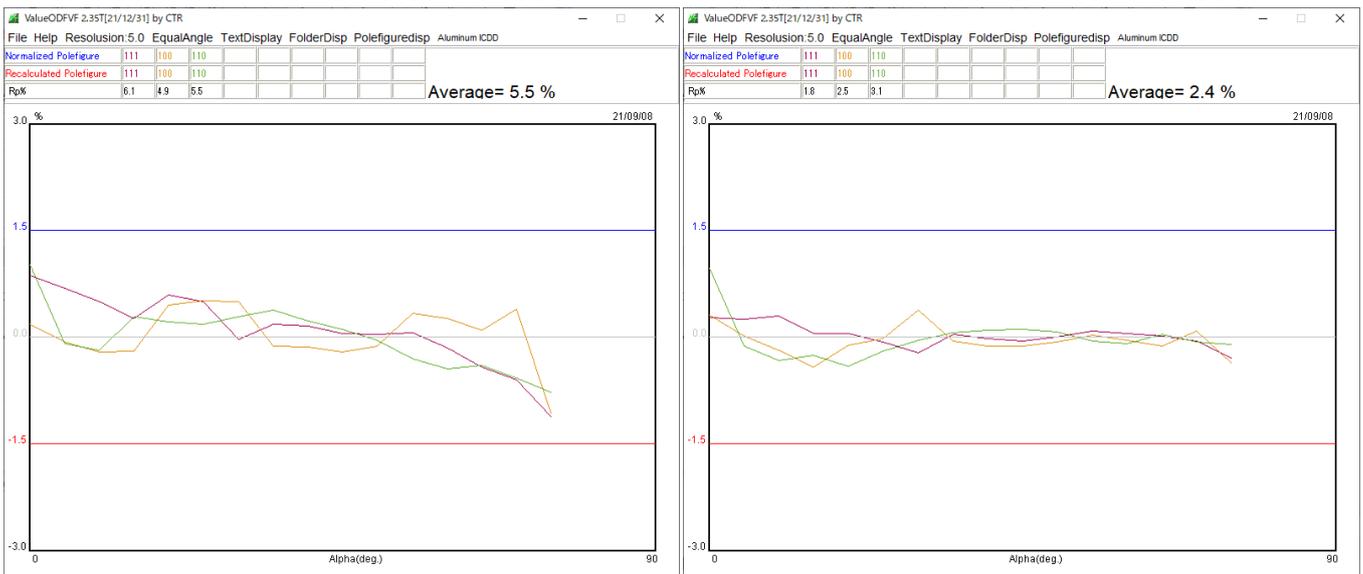
2. 2 配向データの補正解析

バックグラウンドを確認しバックグラウンド除去、defocus補正、規格化、Rp%の最適化



最適化Rp%以前

最適化Rp%後



before 確認後 ValueODFVF 画面を閉じた後、Afterを確認する。

5. 5%が2.4%に改善、1.5%ライン内で測定データ、補正処理に問題なし
確認後、ValueODFVF画面を閉じる

3. LaboTex 入力データ作成 (PFtoODF3 ソフトウェア)

PFtoODF3 8.23YT[17/03/31]

File Option Symmetric Software Data

Lattice constant

Material Aluminum.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 7 - O (cubic)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
111-OSC_chB0DS_2.TXT	1,1,1	38.42	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200-OSC_chB0DS_2.TXT	2,0,0	44.64	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220-OSC_chB0DS_2.TXT	2,2,0	65.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

```

111-OSC_chB0DS_2.TXT 200-OSC_chB0DS_2.TXT 220-OSC_chB0DS_2.TXT
Structure Code a b c alfa beta gamma
7 1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0
3
2Theta alf-s alf-e d-alf bet-s bet-e d-bet index H K L P/B
38.42 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 1 1 1 1
44.64 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 0 0 1
65.0 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 2 0 1

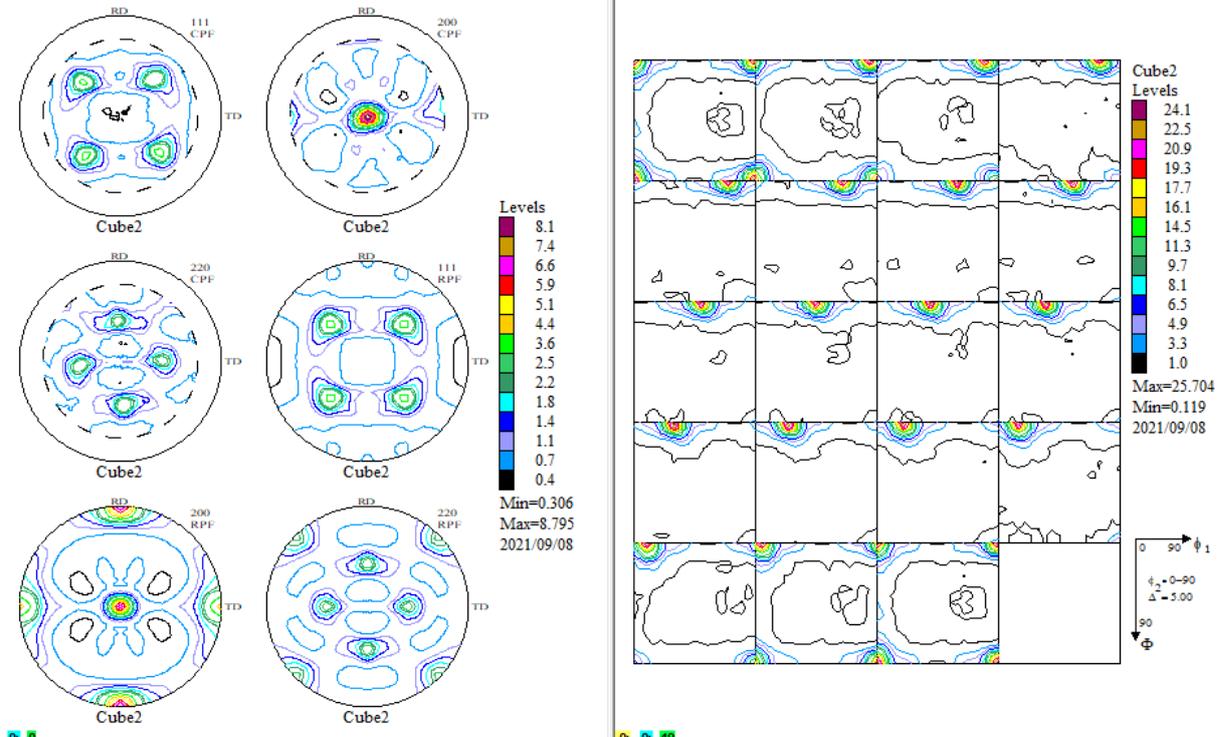
0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800
0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800
0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800
0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800
0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800
0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800
0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800
0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800
0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800 0.432800
0.471100 0.509200 0.439200 0.449000 0.432700 0.392800 0.408200 0.399100
0.417400 0.405500 0.378700 0.398400 0.422600 0.400100 0.399200 0.398500
0.471200 0.440800 0.450300 0.447200 0.431100 0.423400 0.479700 0.446100

```

PFtoODF3 ソフトウェアでは、複数の ODF 向け入力データが作成可能

解析方法の異なる複数の ODF 解析結果を参照する事も重要ですが、今回は LaboTex 単独で解析

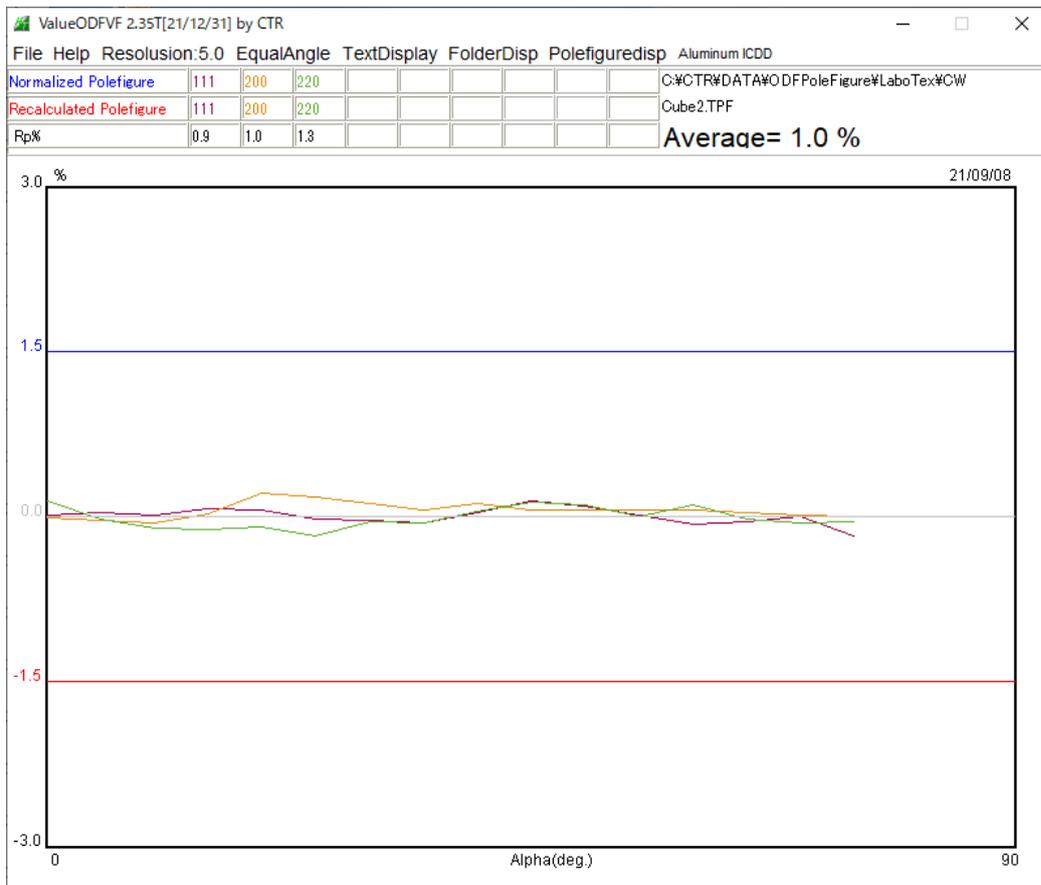
4. LaboTexでODF解析



ODF 解析後、極点図、ODF 図を E X p o r t

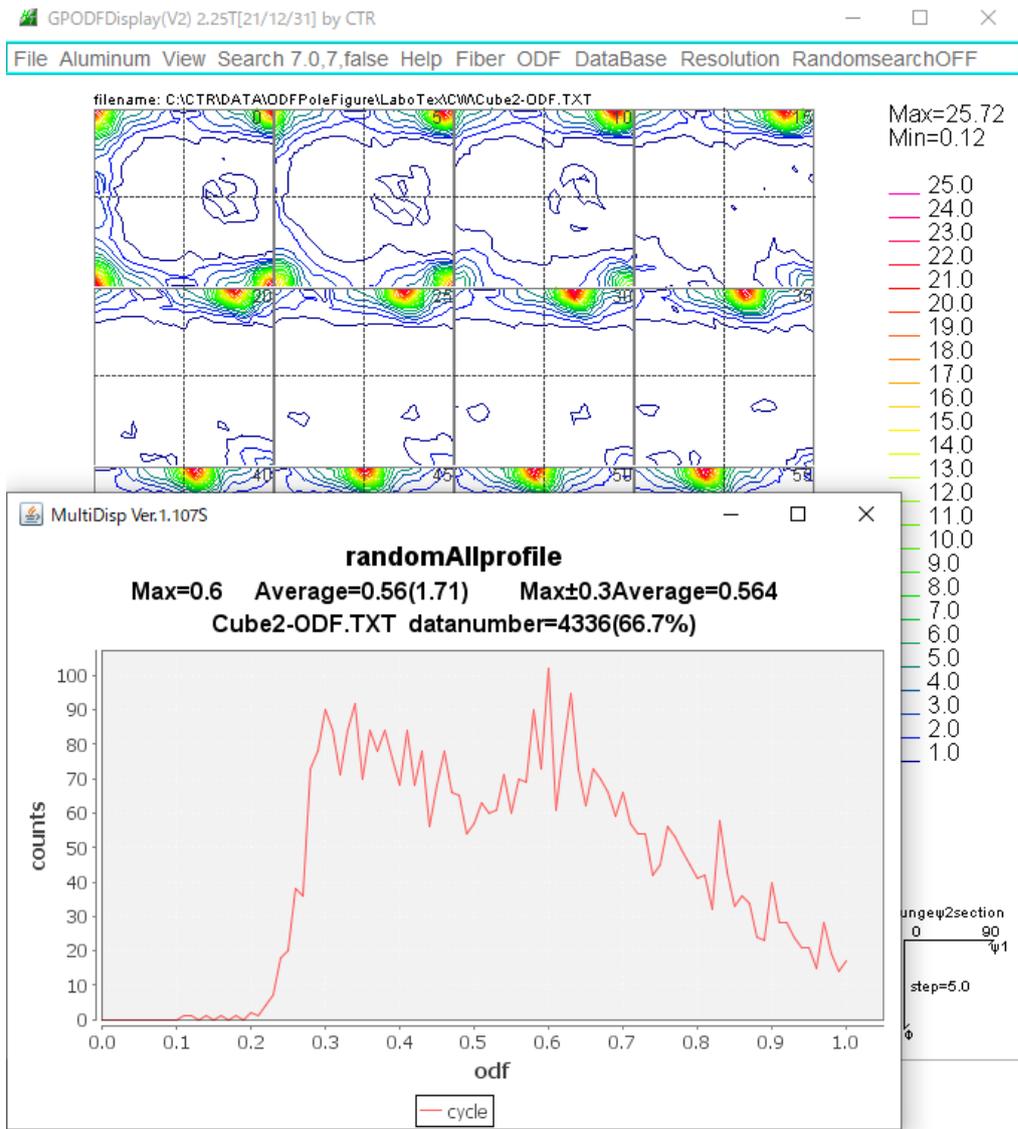
E r r o r 評価

LaboTex の入力極点図、再計算極点図 1 を E x p o r t して ValueODFVF ソフトウェアで Rp% 評価



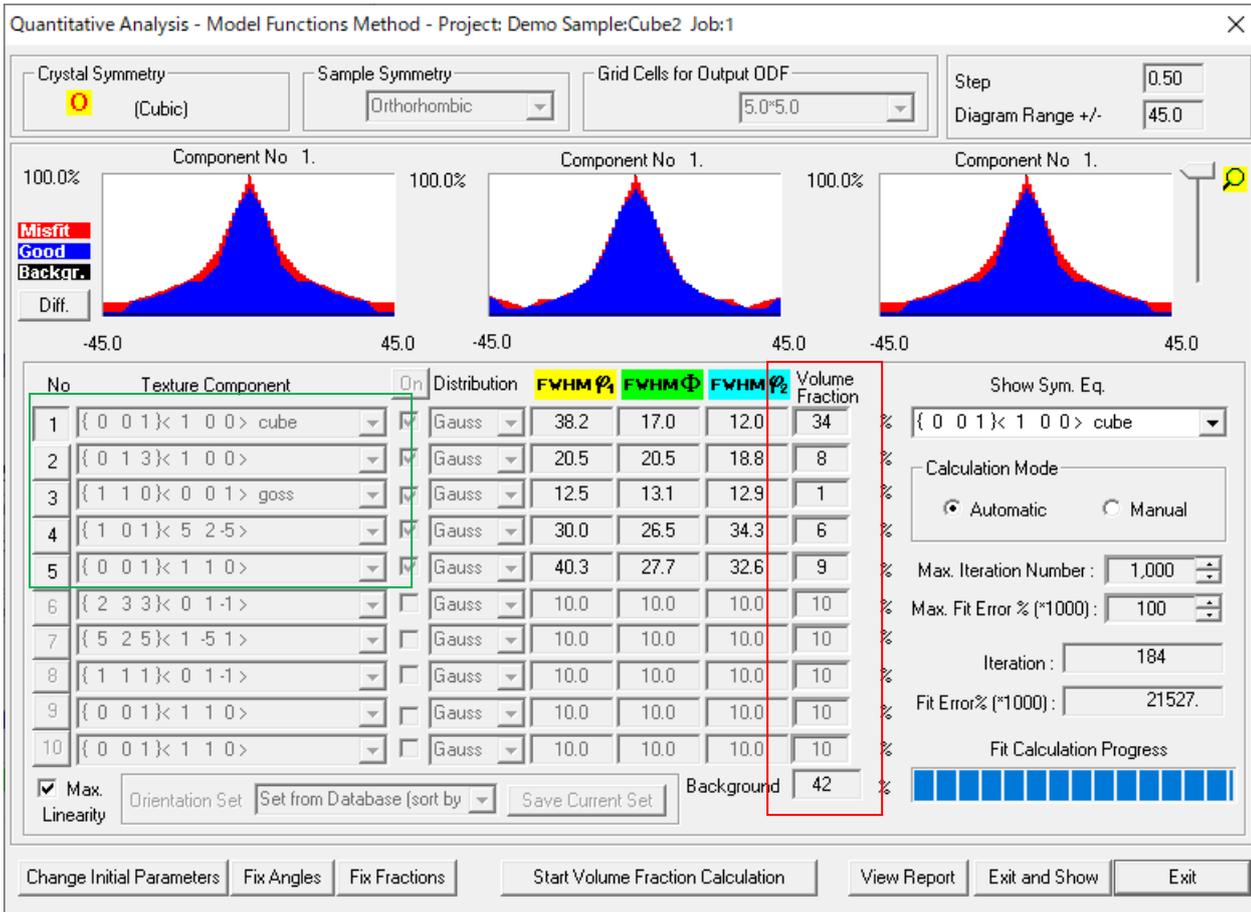
± 1. 5 % 以内に Rp% プロファイルがあり、更に全体の Rp%=2. 0 %、入力極点図と解析に問題なし。

randomLevelを確認する。



方位密度 1.0 以下を観察すると、Max = 0.6 であるが、0.3 の左側が急激に下がっているため、30% の random が存在している模様

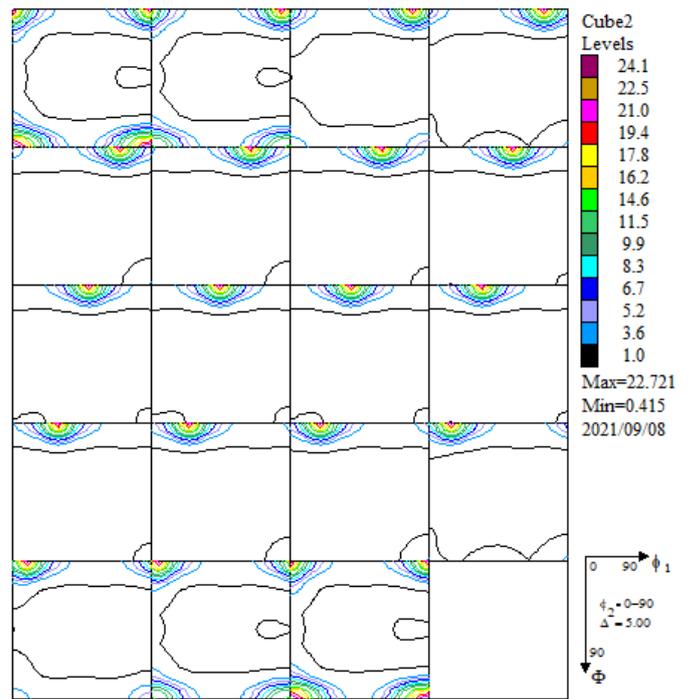
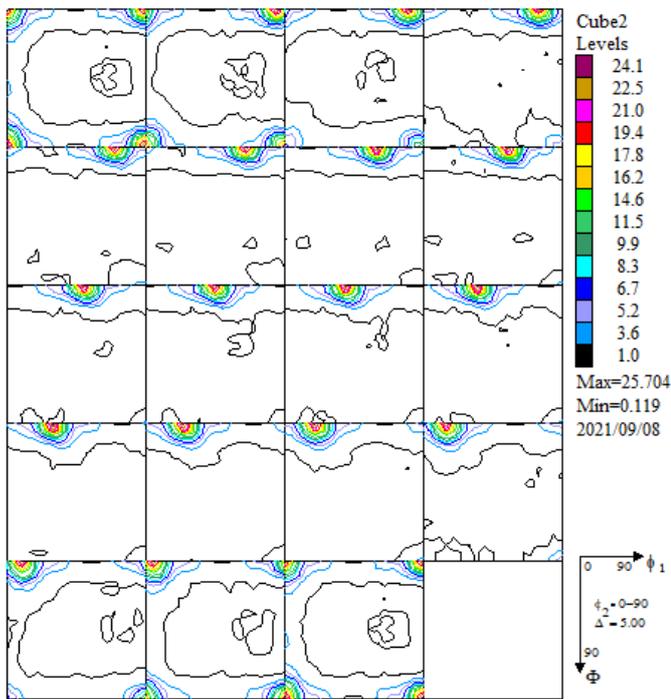
5. 標準的な VolumeFraction 解析



数回繰り返し VolumeFraction 計算を行う

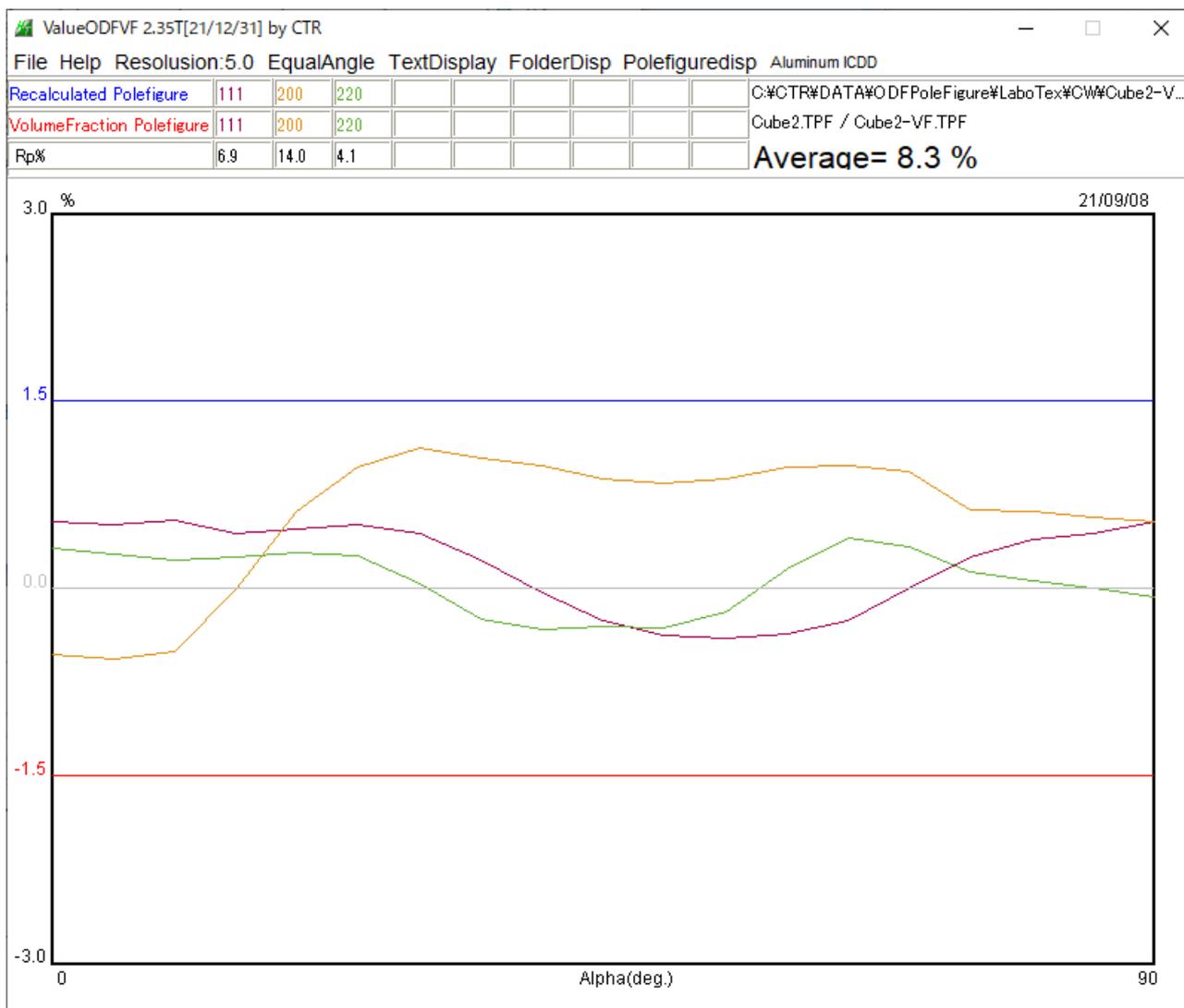
backgroundには、randomの30%が含まれている。

VolumeFraction から計算されたODF 図



VolumeFraction 結果から再計算極点図 2 を作成、Export し、前回の再計算極点図 1 との Rp% 計算

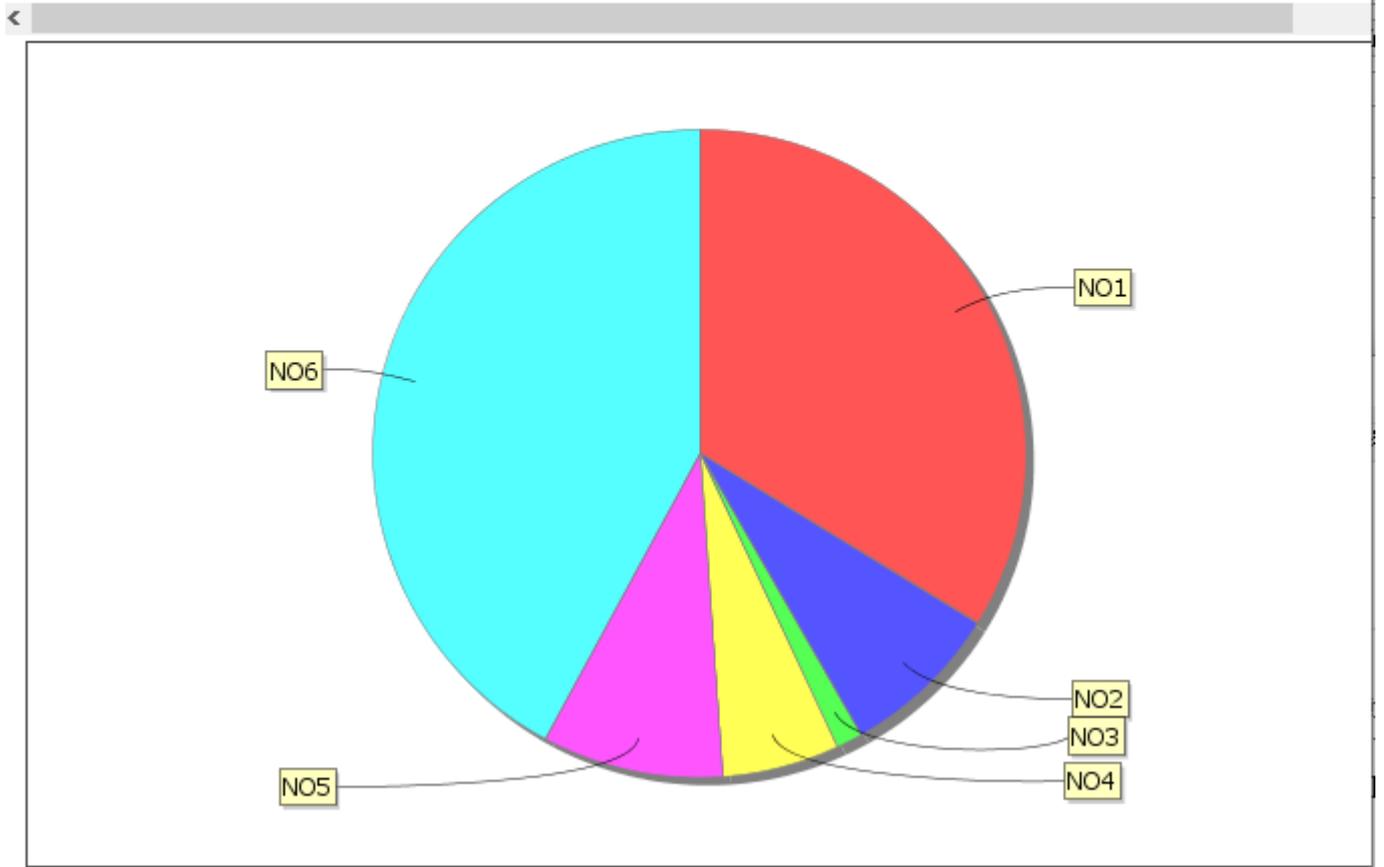
R p %の確認



± 1.5 %以内で解析出来ています。

6. 定量結果

No.	VF (%)	Phi1 (FWHM)	Phi (FWHM)	Phi2 (FWHM)	Orientation
1:	33.82	38.2	17.0	12.0	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
2:	7.95	20.5	20.5	18.8	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >
3:	1.27	12.5	13.1	12.9	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
4:	5.79	30.0	26.5	34.3	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >
5:	9.03	40.3	27.7	32.6	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >
6:	42.15	Background Volume Fraction			



7. ±15度のBOXによる定量

Quantitative Analysis - Integration Methods - Project: Demo Sample:Cube2 Job:1

Orientation Set Name : Set from Database (sort by ODF) Save Current Set

Step: 2.50 Diagram Range +/-: 45.0 CP: BBB View CP

No	Texture Component	On	$\Delta\phi_1$	$\Delta\phi$	$\Delta\phi_2$	Volume Fraction [%]
1	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input checked="" type="checkbox"/>	15.00	15.00	15.00	33.91
2	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input checked="" type="checkbox"/>	15.00	15.00	15.00	8.75
3	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	15.00	15.00	15.00	3.41
4	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	<input checked="" type="checkbox"/>	15.00	15.00	15.00	3.05
5	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input checked="" type="checkbox"/>	15.00	15.00	15.00	27.35
6	{ 2 3 3 } < 0 1 -1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0	
7	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0	
8	{ 1 1 1 } < 0 1 -1 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0	
9	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0	
10	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	10.0	10.0	10.0	
Background						11.86
The Rest						11.66
Orientations Overlap						21.34

Calculate Volume Fraction of Texture Components

View Report Close

この方法 (BOX) では、数値による Error 評価は行えません。