random成分が含まれるアルミニウム合金のVolumeFraction解析 A5052P

> 2023年2月07日 *HelperTex Office*

- 1. 概要
- 2. random成分が含まれるか?
- 3. 極点図
- 4. 極点データ処理
 - 4.1 バックグランド確認
 - 4.2 バックグランドの修正
 - 4.3 defocus補正
 - 4. 4 バックグランド削除、defocus補正、規格化
- 5. 各種 ODF ソフトウエア向けデータ作成
- 6. random%の計算
 - 6.1 LaboTex
- 7. VolumeFraction計算
 - 7.1 LaboTex
 - 7.1.1 検索対象方位を自動決定

1. 概要

極点図の解析において方位の定量(VolumeFraction(VF%))も重要な解析手段であ るが、報告例は少ない。本資料は実サンプルを例に手法の説明を行う。 解析手法は、正確なバックグランド測定を行い、バックグランド除去とdefocus補正を 行い、ODF解析を行う。VF%の打ち切りは解析したODFから予めrandom%を計算し、 VF%の残差(backgroud)がrandom%と一致したら終了 VolumeFraction計算時、方位のズレ修正が重要になります。

VOTUMEFFACTIOn計算時、万位の人レ修正が重要になります。 VF%の評価は

ODF解析による再計算極点図の一致度Rp%評価
 VF%より計算されたrandom%の一致
 極点図から計算したODF図とVF%で計算したODF図の一致
 により評価します。

copperが1% (VF%=1%)、他はreandom







randomlprofileでrandom%を表示 (GPODFDisplayの機能)





2. random成分が含まれるか?

θ / *θ* プロファイルで含まれる可能性を評価



赤プロファイル:ICDD からプロファイル作成 r a n d o m成分が含まれている可能性が高い

3. 極点図

backgroundを除いた方位の組み合わせ

A 方位+B 方位+C 方位+D 方位+r a n d o m=1 0 0%

A方位	B方位	C方位	D方位					
random								
background								



b a c k g r o u n d は極点データ処理で削除

4. 極点データ処理

正確に、ハツククフント削除とdeiocus相正を打り。	
▲ ODFPoleFigure25 4.07T[23,03/31] by C - -	×
File Linear(absolute)3D ToolKit leip initSet BGMode Defocus ondition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization	
ASC(RINT-PC) V 111-N0011ASC 200-N001/ASC 220-N0011ASC	
Holder Pename Renamw-de fe	
Cateration Condition Next Lift/source-Data状期定デー分O¥材料 - AW2011-02-14-標準AEdX#¥A5052PWN0011Hest¥111-N0011ASC Next Lift/source-Data状期定デー分O¥材料 - AW2011-02-14-標準AEdX#¥A5052PWN0011Hest¥111-N0011ASC	
Calcration Codition htt Previs Next L#Mssure-Data#REET-%0xH##4 - AW2011-02-14-###AB####A5052P#N0011Wtest#111-N0011ASC htt DoubleMo_ SeleMode ObubleMo_ SeleMode Minimum(α β) MinimumAverase(α)X 0.5 Trans blinds anele 30.0 Peak sitt 7.0 Peak sitt 7.0 mm Peak sitt 7.0 mm	
c Odcration Codition Previde Next L¥Messure-Data¥∰EF ~50¥##4 Al9211-02-14-4∰#AB##¥#A5052₽¥N0011¥test¥111-N0011ASC Int. Int. Int. Int. Int. Int. Concentration Int.	
Calcration Caldition Previs Next L#Mssure-Data##REF -%0#### AW2011-02-14-###AB####A5052P#N0011West#111-N0011ASC Minimum mo OutbleMo SeleMode LowMode HighMode Nothine BG defocus DEfl2mm*Schulz+RSH5mm Minimum mo Pak sit 7.0 mm Peak sit 7.0	
Calcration Caddition Mext L#Messure=Data##REET=%0####4 BGE##ABB###A5052P#N0011West#111=N0011ASC Prev/ss Next L#Messure=Data##REET=%0####4 BGE##ABB###A5052P#N0011West#111=N0011ASC Prev/ss DoubleMo SteleMode Lemessare=Calcrate##ABB###A5052P#N0011West#111=N0011ASC Prev/ss DoubleMo SteleMode Lemessare=Calcrate##ABB###A5052P#N0011West#111=N0011ASC Prev/ss DoubleMo SteleMode Lemessare=Calcrate##ABB###A5052P#N0011West#111=N0011ASC Prev/ss DoubleMo SteleMode Lemessare=Calcrate##ABB###A5052P#N001West#111=N0011ASC Prev/ss DoubleMo SteleMode Lemessare=Calcrate#ABB###A5052P#N001West#111=N0011ASC Prev/ss DoubleMo SteleMode Lemessare=Calcrate#ABB###A5052P#N001West#111=N0011ASC Prev/ss Prev/ss DoubleMo SteleMode Lemessare=Calcrate#ABB###A5052P#N001West#111=N0011ASC Prev/ss Prev/ss Prev/ss SteleMode Lemessare=Calcrate#ABB###A5052P#N001West#111=N0011ASC Prev/ss Prev/sss Prev/sss Prev/sss Prev/ss Prev/ss Prev/ss	
Biologication Caddition Initial Change Previde Next Lift Maxuee-Data #BREF - MOWH## - Alw2011-02-14-4##ABU###A5052P#N0011WestW111-N0011ASC Previde Next Lift Maxuee-Data #BREF - MOWH## - Alw2011-02-14-4##ABU###A5052P#N0011WestW111-N0011ASC Previde ScheleMade LowMode HightMode Noncomme ScheleMade LowMode HightMode Minimum(cz.8) MinimumAverage(c2)X 0.5 Trans blinds anele 30.0 Peak slit, 7.0 mm Peak Slit / BGS_B3 Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Set Allt Disp Abscialc Trans Schulz reflection method Change Absorption coefficien 133.0 1/cm Thickness@0.2 cm Set 2Theta 38.34 deg. 0.1/kt Profile Defocus(1) functions file EVDATAWtestWdat2WALyandomWdefocus/DEFOCUS,F.TXT Make defocus function files folder(Calc unbackdefocus) DSH12mm+Schulz+RSH5mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) If Re Profile Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH12mm+Schulz+RSH5mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) 0.1/Re Profile <th></th>	
Biodication Caddition Mext Lift Assure - Data #REE 7 ->OV#RH - AW2011-02-14-4##A6052P#N0011WestV111-N0011ASC Mill 1.1.1 Chance DoubleMoc Selection Selection Selection Minimum and A 3 Arithmetic mean V Disp Minimum(2, 0) MinimumAverage(2)X 0.5 Trans blinds andle 30.0 B 0.0 Interpration V Full Disp Peak slift 7.0 mm B3 Slif 7.0 mm Pad Slif 7.0 Slift DoubleMoc Full Disp Airthmetic mean V Disp RbsCale Trans Schulz reflection method O thange Absorption coefficien 33.0 I/cm Thickness 0.2 Cm Set 2Theta 38.34 dee. 0.1/kt Profile Defoorus(1) functions file E LVDATAHtestVdats2VALyandomidefoous/DEFOCUS,FTXT Make defocus function files folder(Calc unbackdefocus) DSH12mm*Schulz+RSH5mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) v 0 1/kt Profile Defoorus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH12mm*Schulz+RSH5mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) v 0 1/Ra Profile Operation files folder(Calc backdefocus) DSH12mm*Schulz+RSH5mm Limit Alfa Defocus valu	

4.1 バックグランド確認(background部分を拡大して確認 黄色、紫)



4.2 バックグランドの修正

バックグランド削除モードをdefousに合わせる

BGMode Measure Con	ditic
Measure	11
Straight(Option)	
Defocus(Option)	
Measure(Calc)	
Minimum	
All background	
	BGMode Measure Con Measure Straight(Option) Defocus(Option) Measure(Calc) Minimum



<u>minP maxP avep bg1 bg2 auto</u> 平均値範囲は各極点図で独立

o 55 alfa

15 20 25 30 35 40 45 50

60 65 70 75 80 85 90

4.3 defocus補正

d e f o c u s プロファイルは受光スリット幅と測定 2 θ 角度で決定される 以下図では補正量を示す左側が極点図の外側、反射法では α 角度 1 5 度より始まる。



4.4 バックグランド削除、defocus補正、規格化

データ処理結果



予測Rp%



予測 Rp%プロファイルはプラスマイナス1.5%以内で正常である。

5. 各種 ODF ソフトウエア向けデータ作成



名前	更新日時 ^	種類
📒 LaboTex	2023/02/05 21:05	ファイル フォルダー
늘 StandardODF	2023/02/05 21:05	ファイル フォルダー
📒 Tex Tools	2023/02/05 21:05	ファイル フォルダー
늘 popLA	2023/02/05 21:05	ファイル フォルダー
TEX MTEX	2023/02/05 21:05	ファイル フォルダー
💼 newODF	2023/02/05 21:05	ファイル フォルダー
🖳 220-NO011.ASC	2011/04/13 11:00	RINT2000774-
🖳 111-NO011.ASC	2011/04/13 11:00	RINT2000774-
🖳 200-NO011.ASC	2011/04/13 11:00	RINT2000774-
111-NO011_chB02D2S_2.TXT	2023/02/05 19:34	テキスト文書
📳 200-NO011_chB02D2S_2.TXT	2023/02/05 19:34	テキスト文書
📳 220-NO011_chB02D2S_2.TXT	2023/02/05 19:34	テキスト文書

6. random%の計算

解析 ODF 図をExportし、GPODFDisplayの機能で計算 6.1 LaboTex

J. I Laborex



7. VolumeFraction計算

7.1 LaboTex

DataBase管理

1/4対称でVolumeFraction計算のため、以下を削除

Prientations Type Database									
Crystal Symmetry Systems	Number	Number of Orientations							
Cubic		22							
Database									
No Orientation Type Name	P ₁	Φ	19 2						
14 { 2 3 3} < 0 1 -1 > 15 { 1 1 1 } < 0 1 -1 > 16 { 1 1 2 < 1 -1 0 >	-113.09 -120.00 0.00	50.24 54.74 35.26	33.69 45.00 45.00						
17 { 1 2 3} 4 1 2>	-46.91	36.70	26.57						
18 { 1 2 3}< 4 1 2> H 19 { 1 3 2}< 6 4 3>S-1	-46.91 27.03	36.70 57.69	26.57 18.43 L						
20 { 2 3 1}< 3 4 6>S-2 21 { 2 1 3}<-3 6 4>S-3 22 { 2 3 1}<-3 4 6>S-4	52.87 58.98 -127.13	74.50 36.70 74.50	33.69 63.43 33.69						
Delete Edit	Nou	New {	אישערא ואם						
	INCOV	HCW (
Orientation Euler Angles	14 (-360 - 360)	Ф (-180 - 18	<u>الالالالالالالالالالالالالالالالالالال</u>	<u>)</u>					
Orientation Euler Angles Fiber Angle Part Name (0.0, 0.0, 0.0) Add/Change	14400 (-360 - 360)	Ф (-180 - 18	142)-00497 162 30) (-360 - 360	<u>)</u>					

Orientations Type Database										
Crystal Symmetry Systems	Number of Orientations									
Cubic	18									
Database										
No Orientation Type Name	P1 P P2									
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	0.00 18.43 0.00 26.57 48.19 26.57 23.09 50.24 56.31 0.00 25.24 45.00 -113.09 50.24 33.69 -120.00 54.74 45.00 0.00 35.26 45.00 -46.91 36.70 26.57 27.03 57.69 18.43									
Delete Edit	New New (HKL) <uvw></uvw>									
Orientation Euler Angles Fiber Orientation Type Name Angle Part Name { 0.0, 0.0, 0.0}	P1 Φ P2 (-360 - 360) (-180 - 180) (-360 - 360)									
Add/Change	Cancel									
Close										

7.1.1 検索対象方位を自動決定

Crystal ! <mark>O</mark>	Symmetry San (Cubic)	nple Syl	Symmetry Grid Cells for Output ODF Step Diagram Range						Step Diagram Range +/-	0.50		
00.0% isfit ood Ickgr. Diff.	Component No 1.		10	0.0%		Compor	nent No 1.		100.0%		Component No 1.	
-4	\$5.0	45	0	-45	5.0			45.	.0	-45.0)	45.0
No	Texture Component		On	Distribut	tion	FYHM 🖗	г₩нмФ	FWHM 🖗	Volume Eraction		Show Sym. Eq.	
1 {	0 0 1 }< 1 0 0 > cube	-		Gauss	Ŧ	19.6	19.7	19.6	16	%	{001}<100> cub	e 🖣
2 {	0 1 3}< 1 0 0>	-		Gauss	\mathbf{v}	20.0	19.9	19.9	11	%	Calculation Mode	
3 {	1 1 0 }< 1 -1 2 > brass	-		Gauss	-	20.0	20.0	20.0	8	%	Automatic	Manual
4 {	1 1 0}< 0 0 1> goss	-	$\overline{\mathbf{A}}$	Gauss	Ŧ	20.2	20.1	20.0	14	%		
5 {	1 1 0}< 1 -1 1>	-		Gauss	-	20.0	20.0	20.0	6	%	Max. Iteration Number :	1,000
6 {	1 32}< 6-43>S-1	-	$\overline{\mathbf{v}}$	Gauss	-	20.0	20.0	20.0	16	%	Max. Fit Error % (*1000) : 厂	100 🗧
7 {	1 1 2 < 1 1 ·1 > copper	-		Gauss	Ŧ	20.0	20.0	20.0	9	%		995
8 {	1 0 1 }< 5 2 - 5 >	-		Gauss	-	20.0	20.0	20.0	7	%	Iteration :	000
9 {	1 2 3}< 4 1-2> R	-		Gauss	-	20.0	20.0	20.0	6	%	Fit Error% (*1000) :	62352.
10 {	5 2 5 }< 1 -5 1 >	-		Gauss	-	10.0	10.0	10.0	10	%	Fit Calculation Pre	ogress
✓ Max Linearit	x. Orientation Set Set from Da	atabase	(so	rt by 👻		ave Curren	t Set	ackground	7	%		

登録 s れている方位の中から可能性の高い方位を表示

7.1.2 Goss, S, copperのずれを確認





Goss, copperのズレが大きい

Goss修正 {023} <100>追加

ODF 解析結果

仮の VolumeFraction 結果



S方位修正







方位として表れ難いF i b e r を指定

↑ C ↓ → L Step 5.00 ÷ 🐅 55.64 ÷ 💁 16.86 ÷ 🥵 45.00 ÷ HKL (3 314) UVW [[-2 -12 3]]



dataBaseに追加

– Database					
No Orientatio	n Type Name	P1	Φ	P 2	
15 { 2 3 3} 16 { 0 0 1} 17 { 1 1 1} 18 { 1 1 1} 19 { 0 2 3}	<pre>< 0 1-1> < 1 1 0> <-1 -1 2> < 0 1-1> < 0 1-1> < 1 0 0></pre>	-113.09 -45.00 90.00 -120.00 0.00	50.24 0.00 54.74 54.74 33.69	33.69 0.00 45.00 45.00 0.00	
20 { 2 1 4 } 21 { 2 3 6 } 22 { 3 314 } 23 { 1 2 8 }	< -7 -10 6 > S-sft < -9 -8 7 > Cop-s < -2 -12 3 > < -2 -7 2 >	64.69 102.65 55.64 79.76	29.21 31.00 16.86 15.62	63.43 33.69 45.00 26.57	
Delete	Edit	New	New {	HKL} <uvv< td=""><td>V></td></uvv<>	V>

登録した方位が上位にランクされる。



検索からはgoss, copperは除外して検索

Errorが収束し、random%=7%を目標に再検索を繰り返す



繰り返し検索でbackgroundは振動しながら、収束する。





VolumeFraction結果



上段:ODF解析結果、下段:VolumeFraction結果



ODF解析結果とVolumeFraction結果のRp%



VolumeFraction結果のrandom%=7%



VolumeFraction結果にはゴーストは発生しないので、 最小値がrandom%である。

VolumeFraction

LaboTex2 > USER > A5052RLAB > O-Cubic.LAB > Demo.LAB > A5052RLAB > Job03

名前	更新日時	種類	サイズ
A5052P.APF	2023/02/06 22:23	APF ファイル	6 KB
A5052RODF	2023/02/06 22:19	ODF ファイル	27 KB
A5052RPOD	2023/02/06 22:21	POD ファイル	2 KB

LaboTex - Texture - Quantitative Analysis Report User: A5052P Project: Demo Sample: A5052P Job: 3 Date:2023/02/06 Time:22:21:33

Volume Fraction		FWF	HM Phil	FWHM Phi	F	WHM Phi2			01	rien	ntat	ior	1			
Component 11.83	No	1	- Distri 13.1	bution :G 18.3	auss	15.1	{	0	0	1	}<	1	0	0 3	>	cube
Component 7.98	No	2	- Distri 19.0	bution G 13.6	auss	14.5	{	0	1	3	}<	1	0	0	>	
Component 9.85	No	3	- Distri 29.6	bution G 12.2	auss	15.7	{	2	3	6	}<	-9	-8	7	>	Cop-s
Component 22.71	No No	4 5	- Distri 37.6	bution 36 12.9	auss	16.0	{	2	1	4	}<	-7	-10	6	>	S-sft
10.30	No No	р С	- Distri	bution G 14.8	auss	14.5	{	0	2	3	}<	1	0	0	>	
11.19	NO Mo	0 7	- Distri 36.1	bution in 13.0 hution iC	auss	16.3	{	1	1	0	}<	1	-1	2	>	brass
7.79	No No	ر د	24.7	bution is 16.9 bution iG	auss	19.0	{	3	3	14	}<	-2	-12	3	>	
3.77	No.	q	23.5	25.7 bution C		24.3	{	1	1	0	}<	1	-1	1	>	
4.72 Component	No	10	20.4 - Distri	26.5 bution :G	auss allee	22.9	{	1	2	8	}<	-2	-7	2	>	
2.21		10	22.9	18.5	4400	20.0	{	1	0	1	}<	5	2	-5 3	>	

7.66 Background Volume Fraction

