

d e f o c u s と V o l u m e F r a c t i o n

2025年05月15日

HelperTex Office

概要

XRDによる極点測定ではEBS Dと異なりd e f o c u sの問題があります。

d e f o c u sは、測定 2θ 角度、受光スリット幅、照射ビームの高さに依存しております。

特に、照射ビームの高さ（S c h u l zスリット幅）に起因しています。

従来は複数のS c h u l zスリットが用意されていたが、最近では1mmに固定されている。

粒径の粗い材料の場合、照射エリアを拡大し平均化測定が望ましい場合があります。

エリア拡大方法は試料の揺動測定が望ましいが、照射ビームの高さ方法調整でも可能である。

平均化を重視するか、d e f o c u sを重視するかの選択になる。

では、実際の解析でd e f o c u sの影響を調べてみます。

手順は、アルミニウムH材をL a b o T e xで解析を行い結果極点図をE x p o r tする事から開始する。E x p o r tされた極点図は完全極点図でE r r o rは含まれていません。

次に完全極点図から極点図の中心からP s i (α) = 75度を切り出す。不完全極点図75

次に不完全極点図75に対し逆d e f o c u s計算を行う。P o l e 75 d e f o c u s

このP o l e 75 d e f o c u sに対し

完全極点図

75度極点図

逆d e f o c u s

処理なしODF解析

d e f o c u s補正ODF解析

R p p処理ODF解析

の

e r r o r

V o l u m e F r a c t i o n (e u l e r 角度幅可変体積)

積分V o l u m e F r a c t i o n (e u l e r 角度幅固定BOX)

を比較してみます。

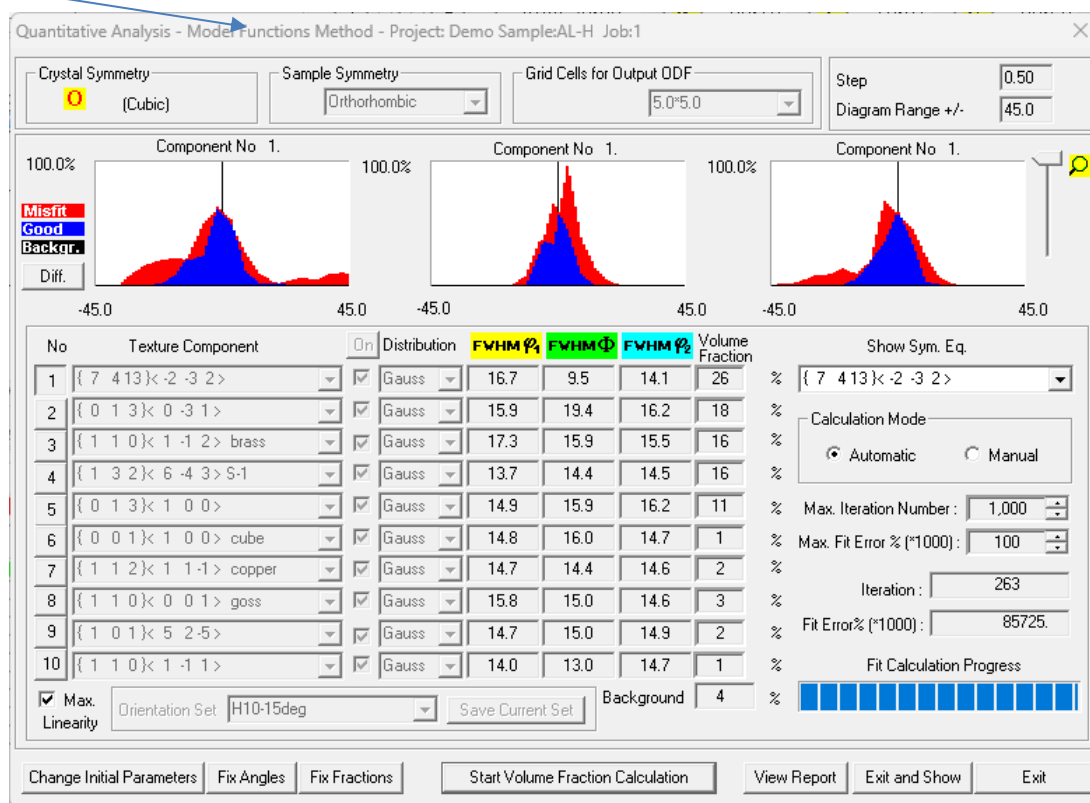
Error 算出

ODF解析後、入力極点図と計算極点図比較

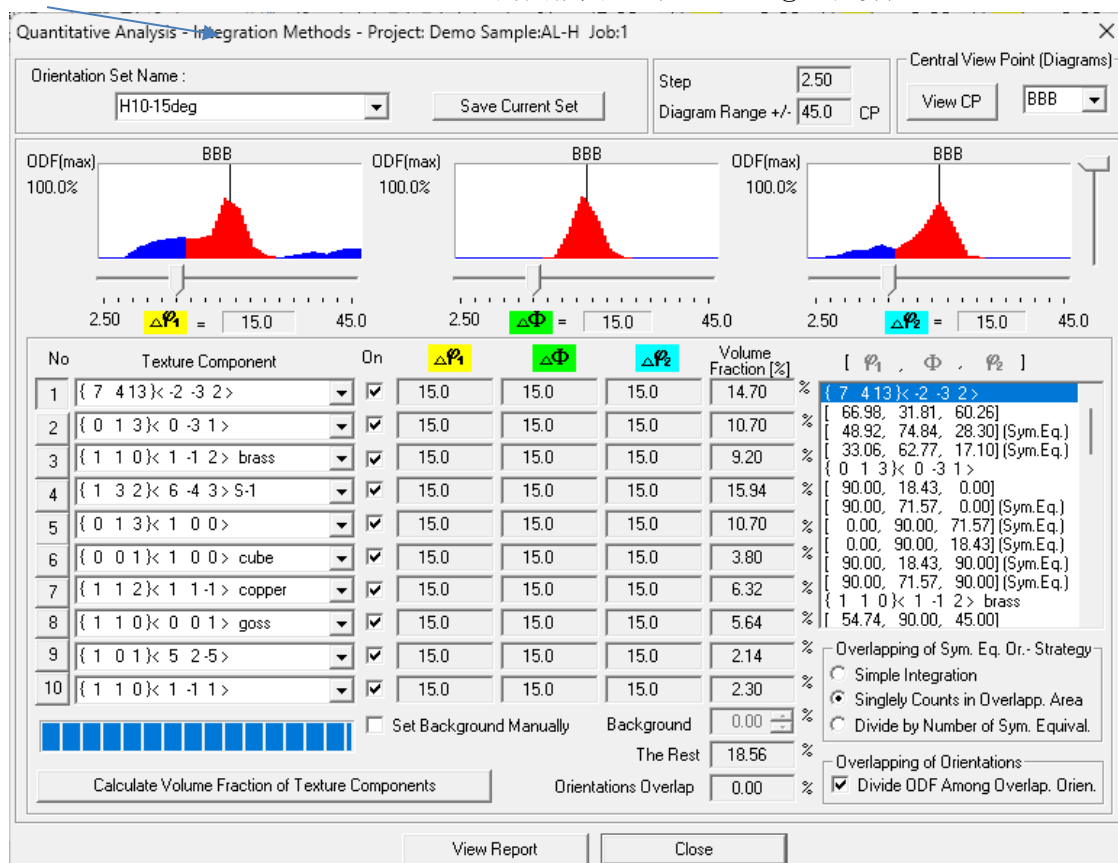
LaboTexの場合、極点図をExportし、ValueODFVFで確認

(StandardODFの場合、OUTPUT1.TXTのError=???)

VolumeFraction (euler 角度幅可変体積)

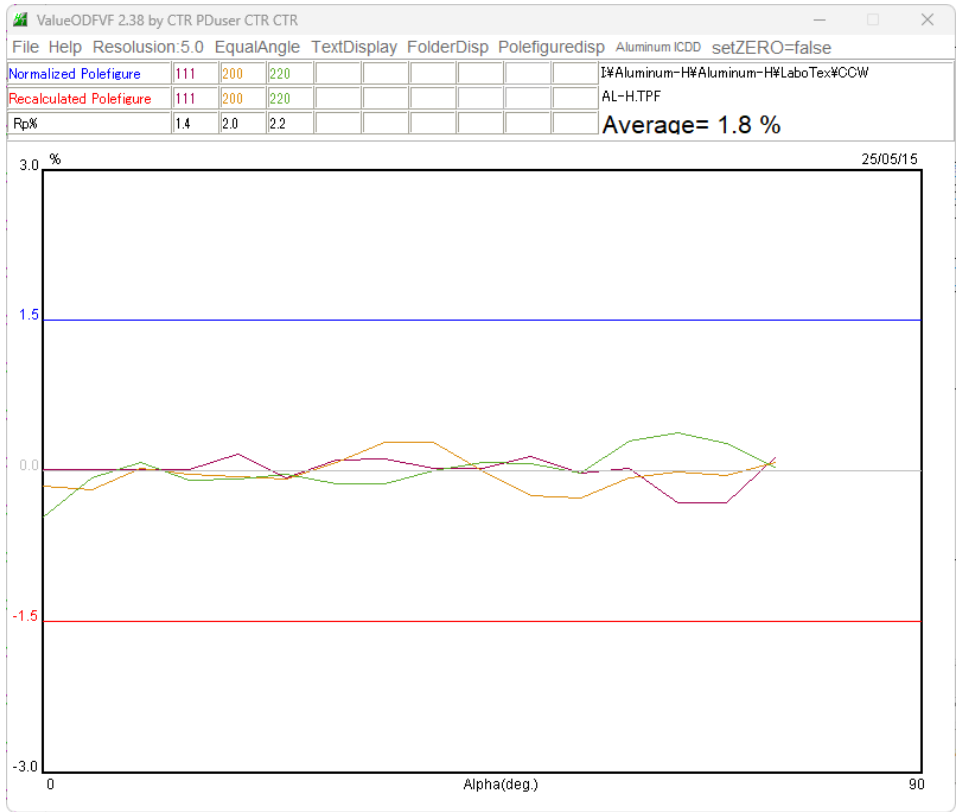


積分VolumeFraction(euler 角度幅固定 (15 deg で計算) BOX)



完全極点図

Error



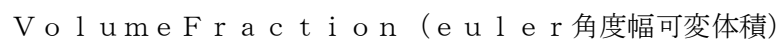
VolumeFraction (euler 角度幅可変体積)

Fraction	Phi1	Phi	Phi2	Orientation
Component No 1 - Distribution :Gauss				
25.88	16.7	9.5	14.1	{ 7 4 13 }< -2 -3 2 >
Component No 2 - Distribution :Gauss				
18.16	15.9	19.4	16.2	{ 0 1 3 }< 0 -3 1 >
Component No 3 - Distribution :Gauss				
15.76	17.3	15.9	15.5	{ 1 1 0 }< 1 -1 2 > brass
Component No 4 - Distribution :Gauss				
15.77	13.7	14.4	14.5	{ 1 3 2 }< 6 -4 3 > S-1
Component No 5 - Distribution :Gauss				
11.05	14.9	15.9	16.2	{ 0 1 3 }< 1 0 0 >
Component No 6 - Distribution :Gauss				
1.36	14.8	16.0	14.7	{ 0 0 1 }< 1 0 0 > cube
Component No 7 - Distribution :Gauss				
2.33	14.7	14.4	14.6	{ 1 1 2 }< 1 1 -1 > copper
Component No 8 - Distribution :Gauss				
3.49	15.8	15.0	14.6	{ 1 1 0 }< 0 0 1 > goss
Component No 9 - Distribution :Gauss				
2.27	14.7	15.0	14.9	{ 1 0 1 }< 5 2 -5 >
Component No 10 - Distribution :Gauss				
0.59	14.0	13.0	14.7	{ 1 1 0 }< 1 -1 1 >

積分VolumeFraction(euler 角度幅固定 (15deg で計算) BOX)

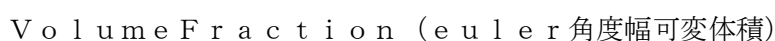
Volume Fraction	Delta Phi1	Delta Phi	Delta Phi2	Orientation
14.70	15.00	15.00	15.00	{ 7 4 13 }< -2 -3 2 >
10.70	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 }< 0 -3 1 >
9.20	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 }< 1 -1 2 > brass
15.94	15.00	15.00	15.00	{ 1 3 2 }< 6 -4 3 > S-1
10.70	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 }< 1 0 0 >
3.80	15.00	15.00	15.00	{ 0 0 1 }< 1 0 0 > cube
6.32	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 2 }< 1 1 -1 > copper
5.64	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 }< 0 0 1 > goss
2.14	15.00	15.00	15.00	{ 1 0 1 }< 5 2 -5 >
2.30	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 }< 1 -1 1 >
0.00	Background Volume Fraction			

E r r o r

積分VolumeFraction(euler角度幅固定 (15degで計算) BOX)

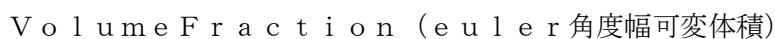
Volume Fraction	Delta Phi1	Delta Phi	Delta Phi2	Orientation
14.78	15.00	15.00	15.00	{ 7 4 13 } < -2 -3 2 >
10.64	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 } < 0 -3 1 >
9.23	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass
15.93	15.00	15.00	15.00	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
10.64	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >
3.82	15.00	15.00	15.00	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
6.22	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper
5.63	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goos
2.16	15.00	15.00	15.00	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >
2.28	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >
0.00	Background Volume Fraction			
18.66	The Best Volume Fraction			

E r r o r

積分VolumeFraction(euler角度幅固定 (15degで計算) BOX)

Volume Fraction	Delta Phi1	Delta Phi	Delta Phi2	Orientation
14.24	15.00	15.00	15.00	{ 7 4 13 } < -2 -3 2 >
9.91	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 } < 0 -3 1 >
11.00	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass
15.84	15.00	15.00	15.00	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
9.91	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >
4.15	15.00	15.00	15.00	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
5.95	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper
6.14	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
2.49	15.00	15.00	15.00	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >
2.78	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >
0.00	Background Volume Fraction			
17.59	The Rest Volume Fraction			
0.00	Orientations Overlap Volume Fraction			

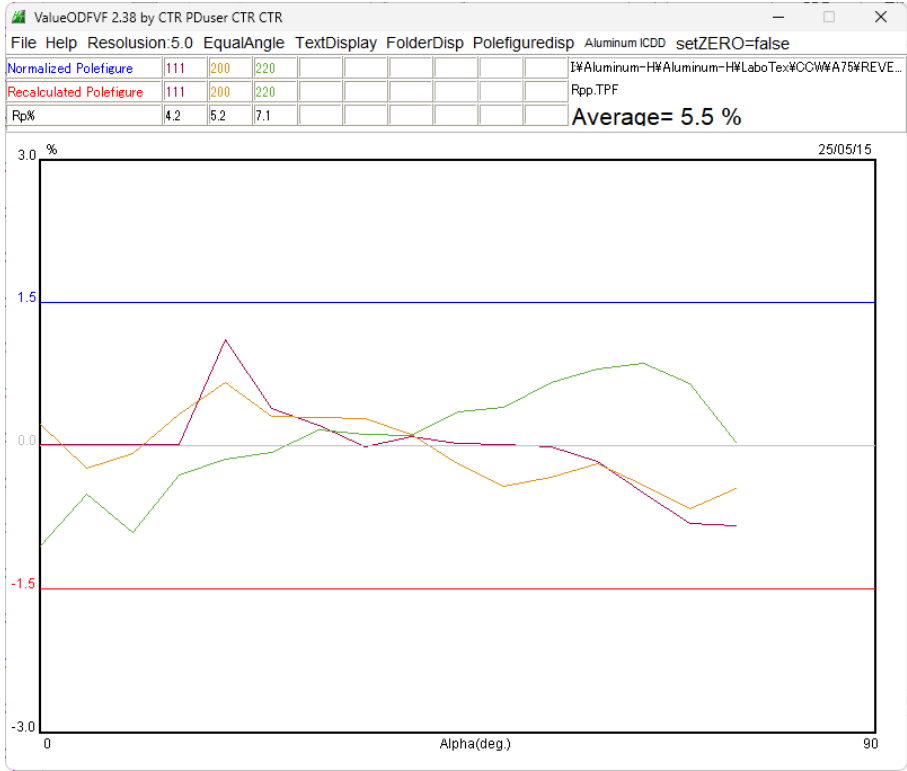
E r r o r

積分VolumeFraction(euler角度幅固定 (15degで計算) BOX)

Volume Fraction	Delta Phi1	Delta Phi	Delta Phi2	Orientation
14.78	15.00	15.00	15.00	{ 7 4 13 } < -2 -3 2 >
10.64	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 } < 0 -3 1 >
9.23	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass
15.93	15.00	15.00	15.00	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
10.64	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >
3.82	15.00	15.00	15.00	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
6.22	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 2 } < 1 -1 1 > copper
5.63	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
2.16	15.00	15.00	15.00	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >
2.28	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >
0.00	Background Volume Fraction			
18.66	The Rest Volume Fraction			
0.00	Orientations Overlap Volume Fraction			

R p %

E r r o r



V o l u m e F r a c t i o n (e u l e r 角度幅可変体積)

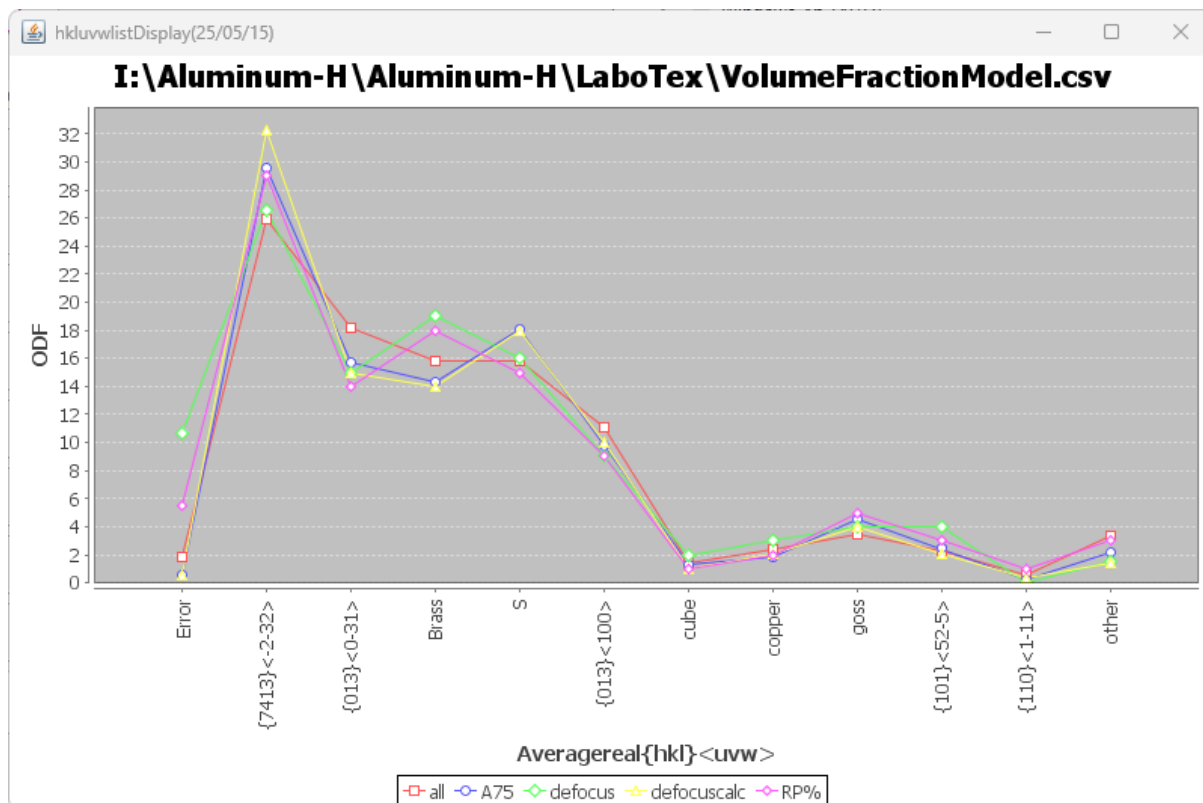
Component No 1	- Distribution :Gauss
29.00	21.9 12.1 14.1 { 7 4 1 3 } < - 2 - 3 2 >
Component No 2	- Distribution :Gauss
14.00	15.7 17.0 15.9 { 0 1 3 } < 0 - 3 1 >
Component No 3	- Distribution :Gauss
18.00	16.0 15.8 15.6 { 1 1 0 } < 1 - 1 2 > brass
Component No 4	- Distribution :Gauss
15.00	15.3 14.4 14.6 { 1 3 2 } < 6 - 4 3 > S-1
Component No 5	- Distribution :Gauss
9.00	15.2 15.5 16.0 { 0 1 3 } < 1 0 0 >
Component No 6	- Distribution :Gauss
1.00	14.4 15.4 15.0 { 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
Component No 7	- Distribution :Gauss
2.00	14.2 14.7 14.4 { 1 1 2 } < 1 1 - 1 > copper
Component No 8	- Distribution :Gauss
5.00	20.2 12.7 15.1 { 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
Component No 9	- Distribution :Gauss
3.00	14.6 17.0 14.6 { 1 0 1 } < 5 2 - 5 >
Component No 10	- Distribution :Gauss
1.00	14.4 13.7 14.0 { 1 1 0 } < 1 - 1 1 >
3.00	Background Volume Fraction

積分 V o l u m e F r a c t i o n (e u l e r 角度幅固定 (1 5 d e g で計算) B O X)

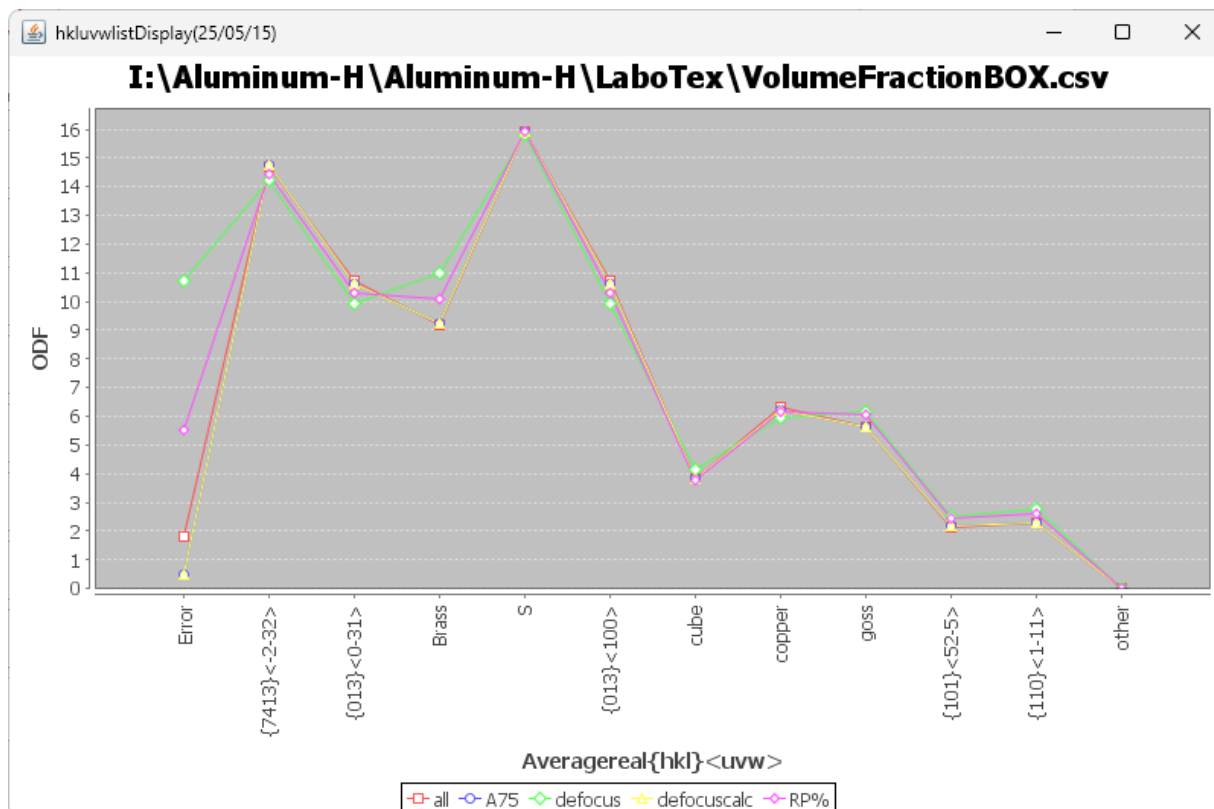
Volume Fraction	Delta Phi1	Delta Phi	Delta Phi2	Orientation
14.42	15.00	15.00	15.00	{ 7 4 1 3 } < - 2 - 3 2 >
10.29	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 } < 0 - 3 1 >
10.10	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 1 - 1 2 > brass
15.94	15.00	15.00	15.00	{ 1 3 2 } < 6 - 4 3 > S-1
10.29	15.00	15.00	15.00	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >
3.76	15.00	15.00	15.00	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
6.18	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 2 } < 1 1 - 1 > copper
6.05	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
2.44	15.00	15.00	15.00	{ 1 0 1 } < 5 2 - 5 >
2.59	15.00	15.00	15.00	{ 1 1 0 } < 1 - 1 1 >
0.00	Background Volume Fraction			
17.96	The Rest Volume Fraction			
0.00	Orientations Overlap Volume Fraction			

まとめ

Model



BOX



BOXモードがdefocusありなしに関わらず安定した値を巢メスが、
なぜかBrassの乱れが認められる