

六方晶のTi解析をサポート

2023年01月18日

*HelperTex Office*

1. 概要
2. CTRソフトウェア
3. チタンの基本情報を参照
4.  $\theta/\theta$  プロファイルは？
5.  $\theta/\theta$  測定プロファイルから逆極点計算
6. LotGering 計算
7. Hexagonal の方位解析の基本
8. 逆極点方位
  8. 1 逆極点上の位置に対する Direction, Plane 計算
  8. 2 Direction  $\leftrightarrow$  Plane 切り替え
  8. 3 方位入力
9. 反射 {001} 極点図から配向関数計算 (Cubic は除く)
10. 極が中心付近に存在する反射極点図の配向関数 (Cubic は除く)
11. HCP の Schmid 因子を計算
  11. 1 Slip システムによる方位シュミレーション
  11. 2 LaboTex 計算の Volume Fraction を入力
12. ODF 解析
  12. 1 LaboTex 向けデータ作成
  12. 2 LaboTex で読み込み ODF 解析
  12. 3 ODF 解析
  12. 4 方位の決定
13. 底面 {001} から配向関数計算
14. Export した ODF 図を GPODF Display で解析
  14. 1 random の定量
  14. 2 方位解析
15. 極点図解析
  15. 1 入力極点図と再計算極点図から入力極点図の Error 評価
  15. 2 Volume Fraction の Error 評価
  15. 3 配向関数評価
16. 逆極点図

## 1. 概要

六方晶の代表的金属であるマグネシウムやチタンの方角解析を行う場合、極点測定が行われている。粒径や大きさによりXRD，EBSDで測定され解析が行われている。

XRDによる測定としては、 $\theta/\theta$ プロファイル測定、極点測定がある。

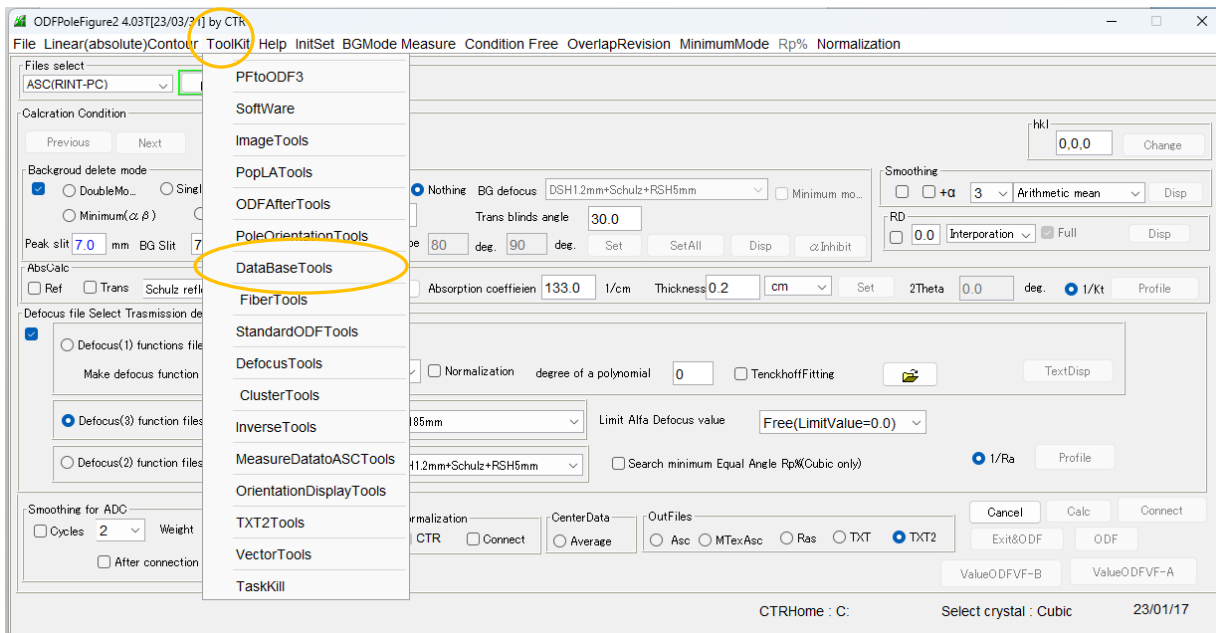
$\theta/\theta$ プロファイル測定からrandomやICDDとの強度比による逆極点、Lotgering解析  
極点測定から、ODF解析、配向関数、逆極点解析などが行える。

以下にCTRソフトウェアによるチタン材料を例に解析方法を説明します。

## 2. CTRソフトウェア

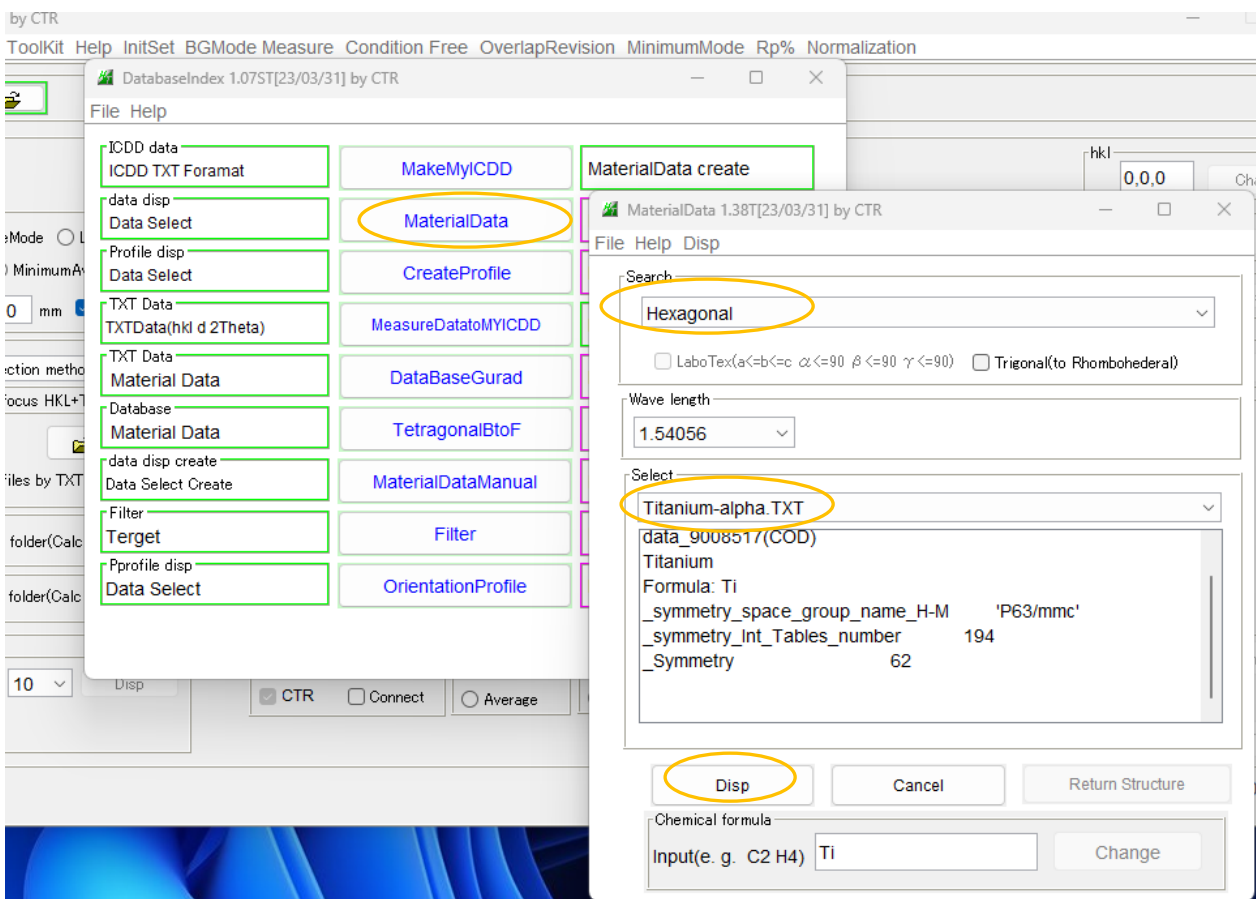
ODFPoleFigureソフトウェアを中心とするXRDシステム

ToolKitからカテゴリ別にソフトウェアを起動



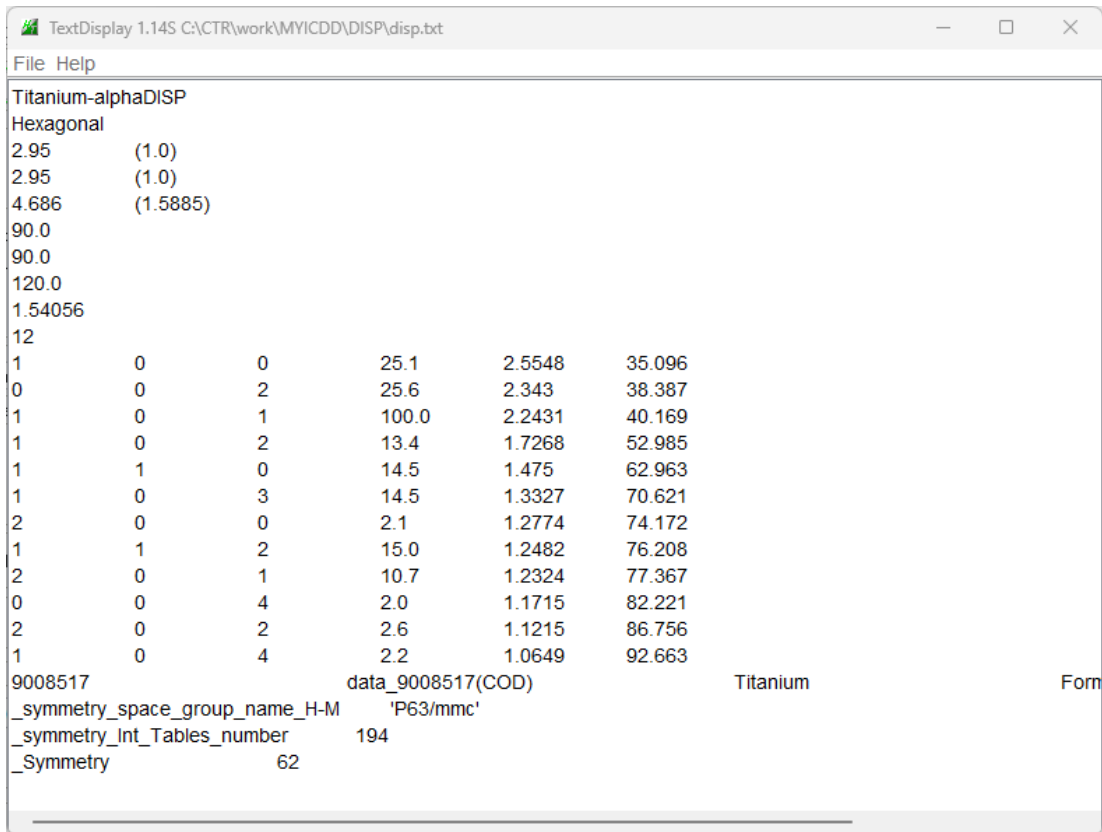
## 3. チタンの基本情報を参照

ToolKit→DataBase→MaterialData



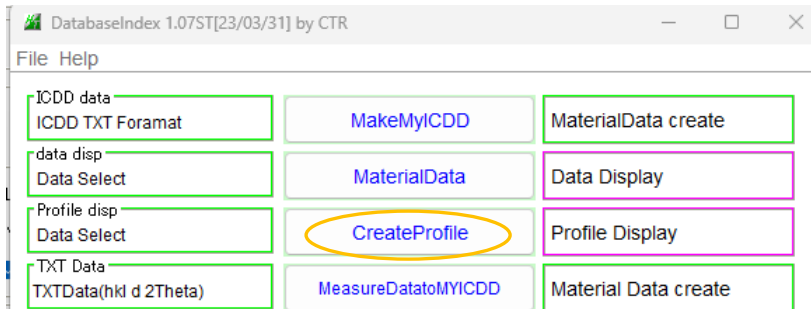
Hexagonal→Titanium-alpha→Disp

波長を1.54056で計算された情報が表示されます。



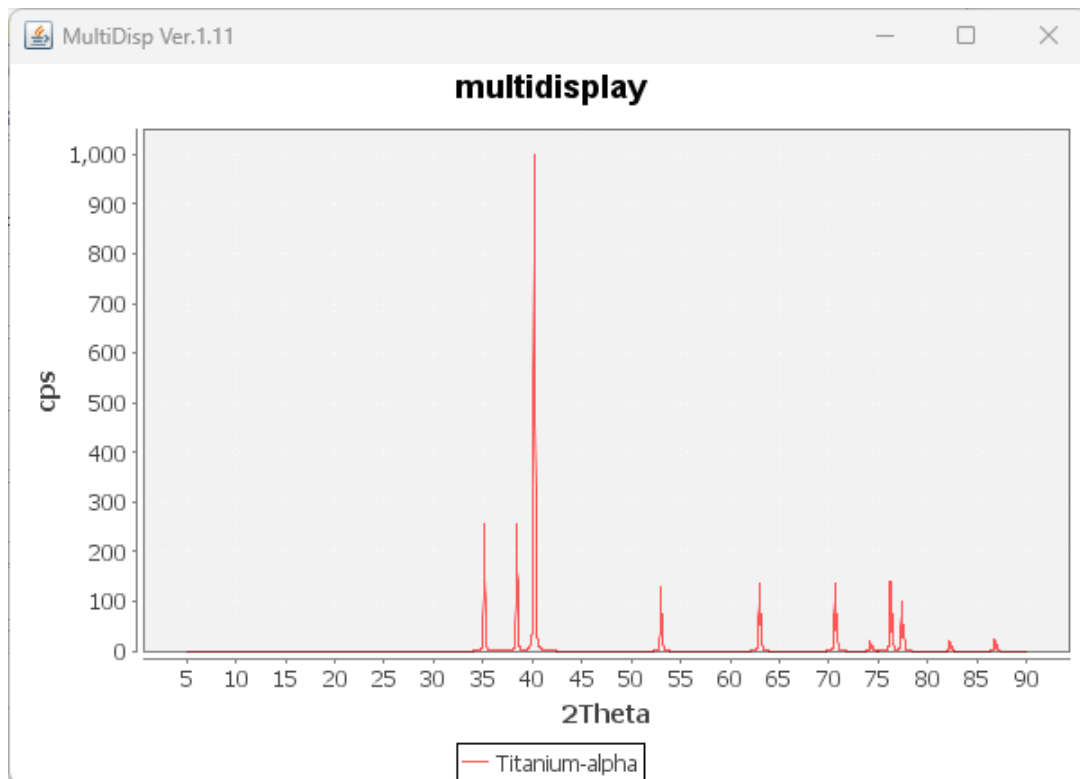
4.  $\theta/\theta$  プロファイルは？

D t a B a s e - > C r e a t e P r o f i l e



T i t a n i u m を 選 択 し C a l c

T i t a n i u m プ ロ フ ァ イ ル が 表 示 さ れ る



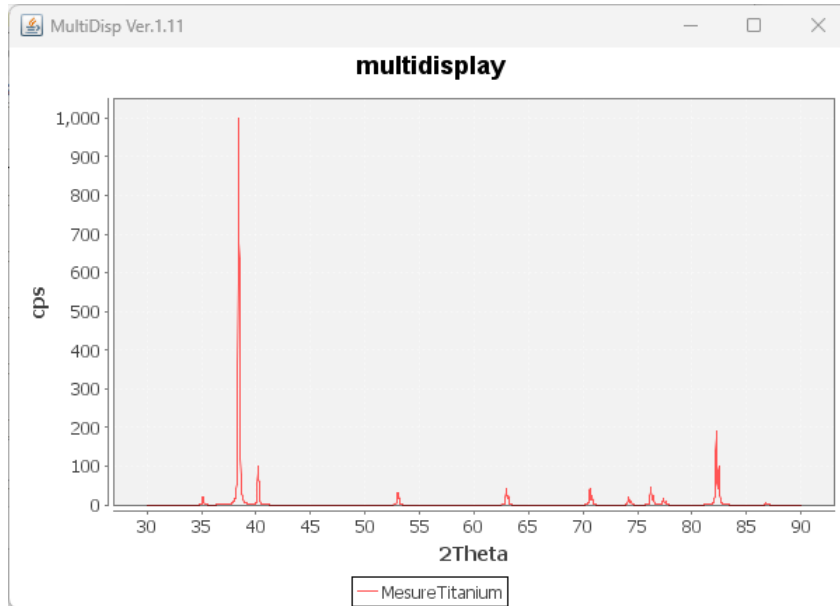
Cu K12 Gaussian/Lorentzian<1 0.5 FWHM Retio 0.8 Angle area 5.0 90.0 Step 0.02

Initialize Calc 100 cps Randomadd Flatrandomadd Asc file create

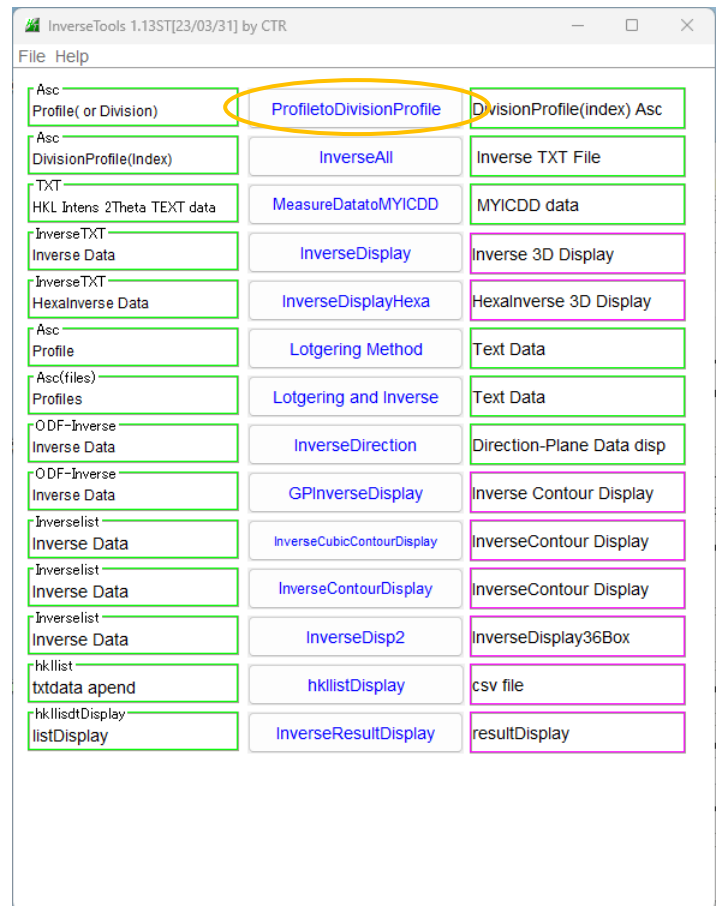
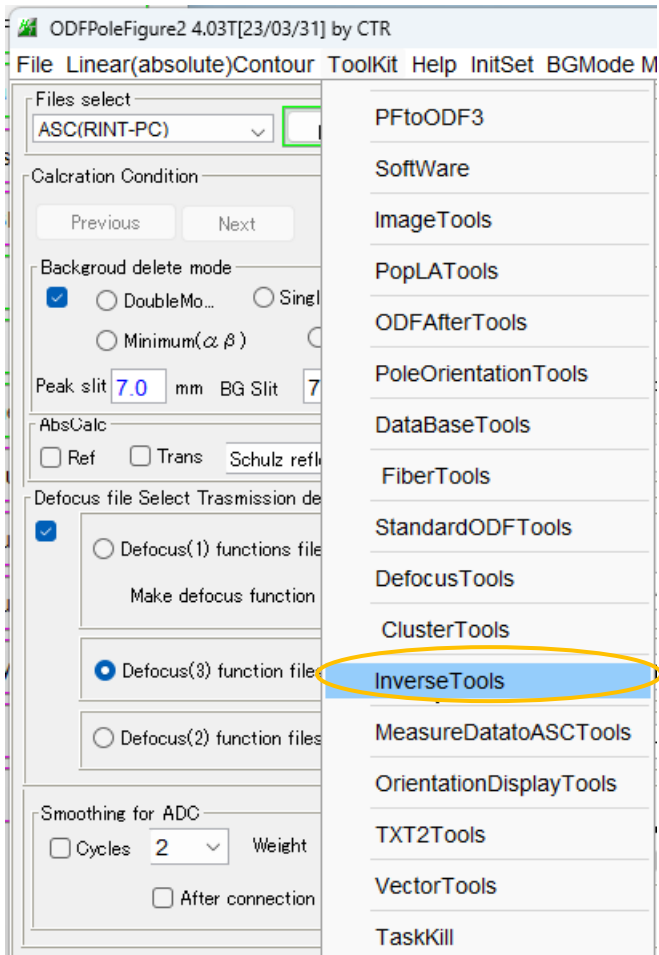
Asc file createでプロファイルのファイル作成

## 5. $\theta / \theta$ 測定プロファイルから逆極点計算

測定データをシュミレーション



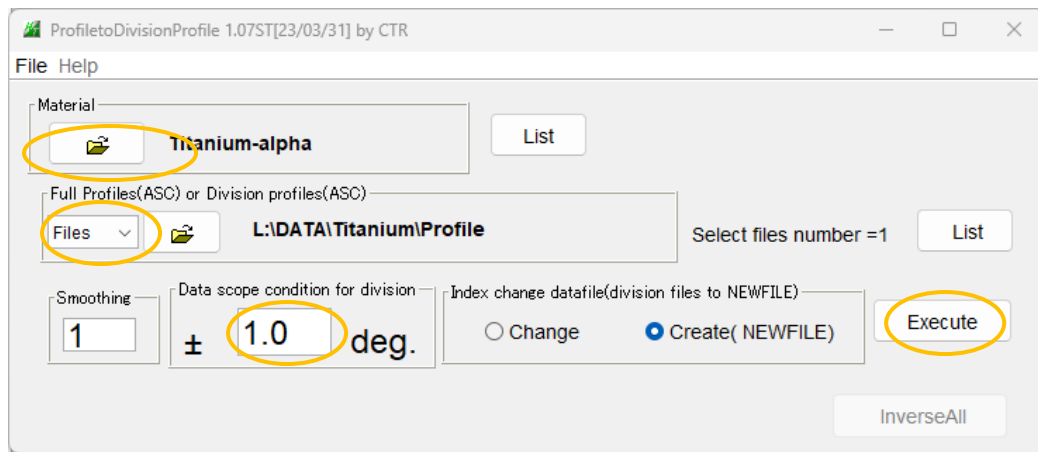
ODFPoleFigure -> Toolkit -> InverseTools



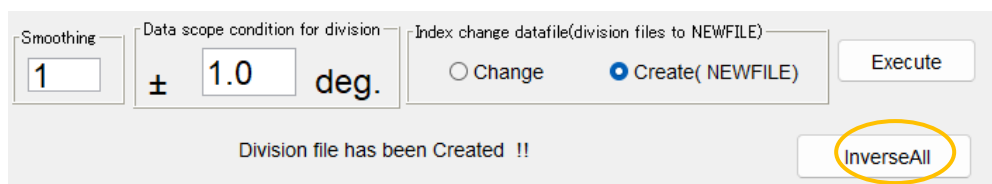
ProfiletoDivisionProfileで

$\theta / \theta$  測定連続プロファイルからピーク毎の分割データを作成

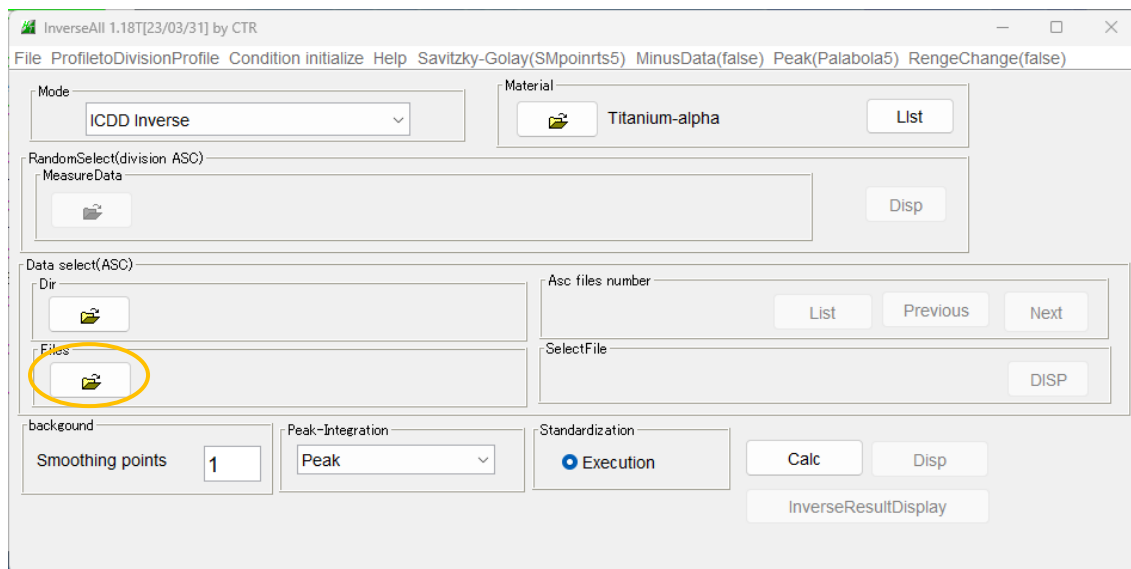
MaterialでTitaniumを選択 複数のプロファイルASCファイルを選択



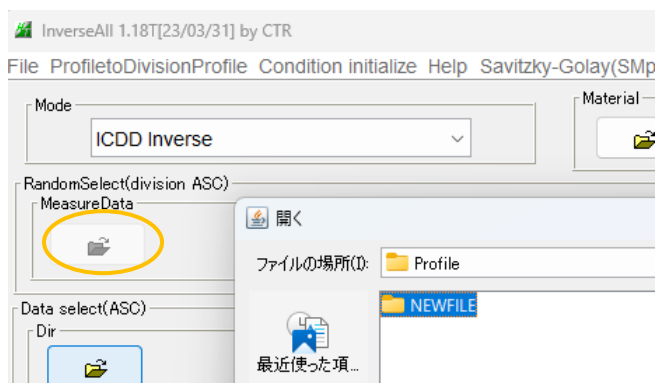
ピーク位置に対する広がりを選択し切り出す



切り出したデータをInverseAllで解析

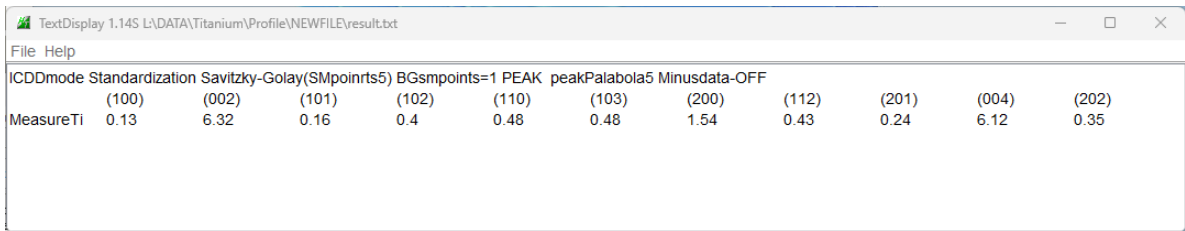
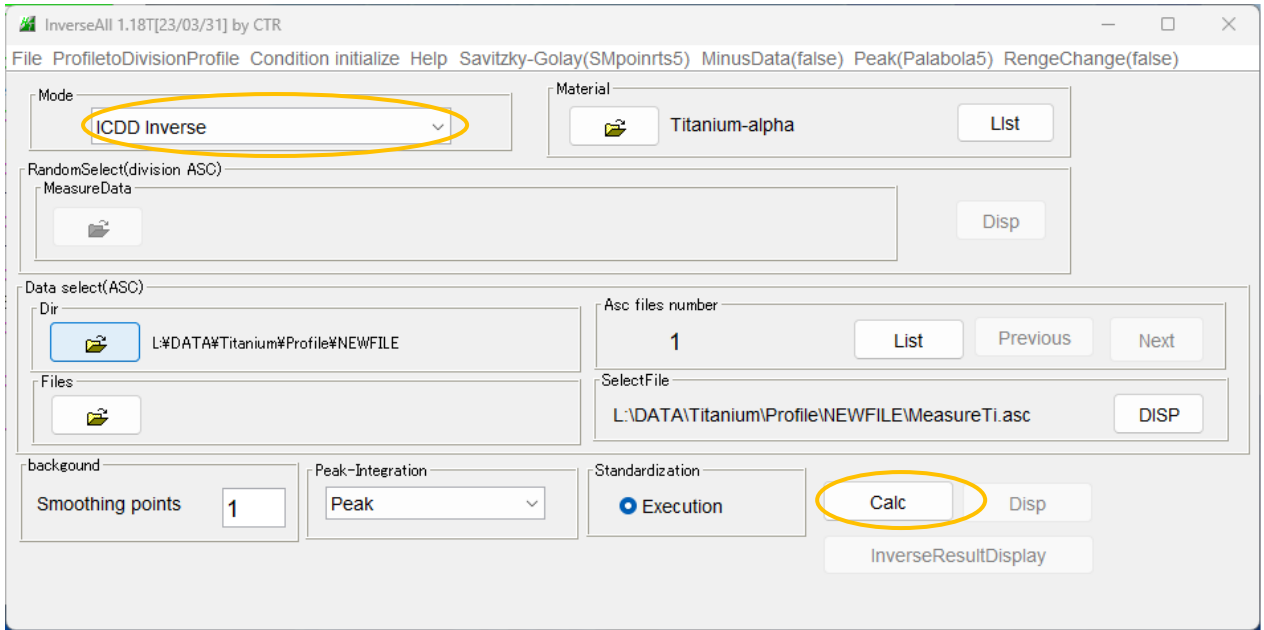


分割ファイルを選択



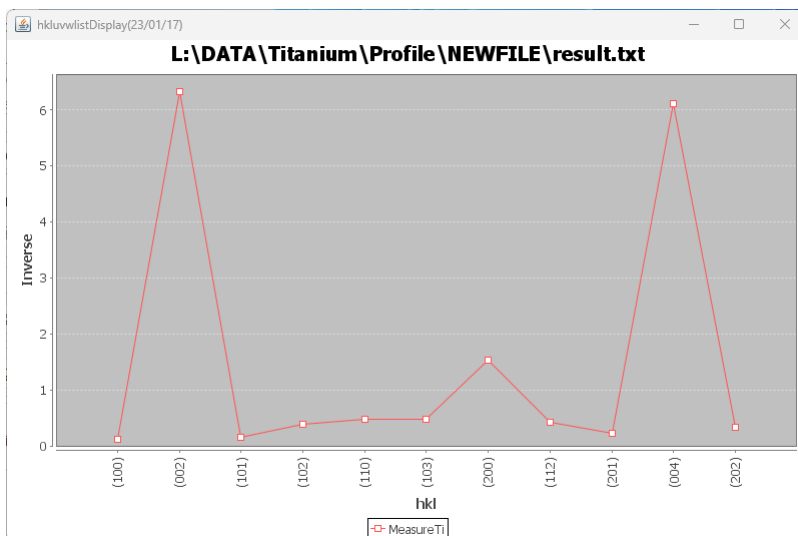
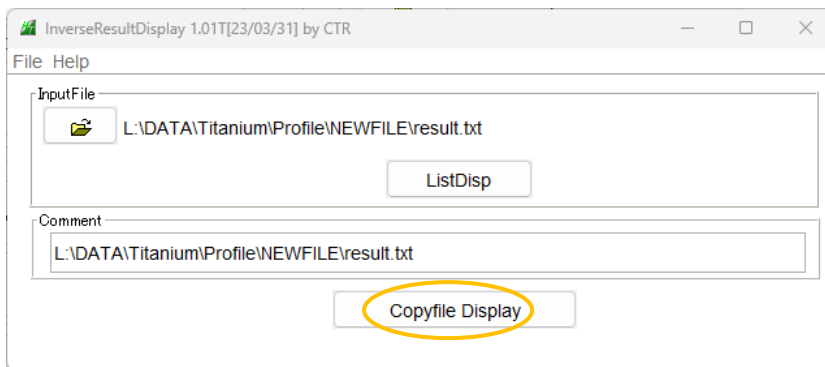


# ICDDデータに対する比率を求める



InverseResultDisplay

にて比率プロファイルを表示



## 6. LotGering 計算

InverseAll 1.18T[23/03/31] by CTR

File ProfiletoDivisionProfile Condition initialize Help Savitzky-Golay(SMpoints5) MinusData(false) Peak(Palabola5) RengeChange(false)

Mode: **Lotgering method** Material: Titanium-alpha List

RandomSelect(division ASC) MeasureData Disp

Data select(ASC) Dir: L:\DATA\Titanium\Profile\NEWFILE Asc files number: 1 List Previous Next

Files: SelectFile: L:\DATA\Titanium\Profile\NEWFILE\MeasureTi.asc DISP

background Smoothing points: 1 Peak-Integration: Peak Standardization: Execution **Calc** Disp

InverseResultDisplay

TextDisplay 1.14S L:\DATA\Titanium\Profile\NEWFILE\result.txt

File Help

Lotgering method Standardization Savitzky-Golay(SMpoints5) BGsmoints=1 PEAK peakPalabola5 Minusdata-OFF

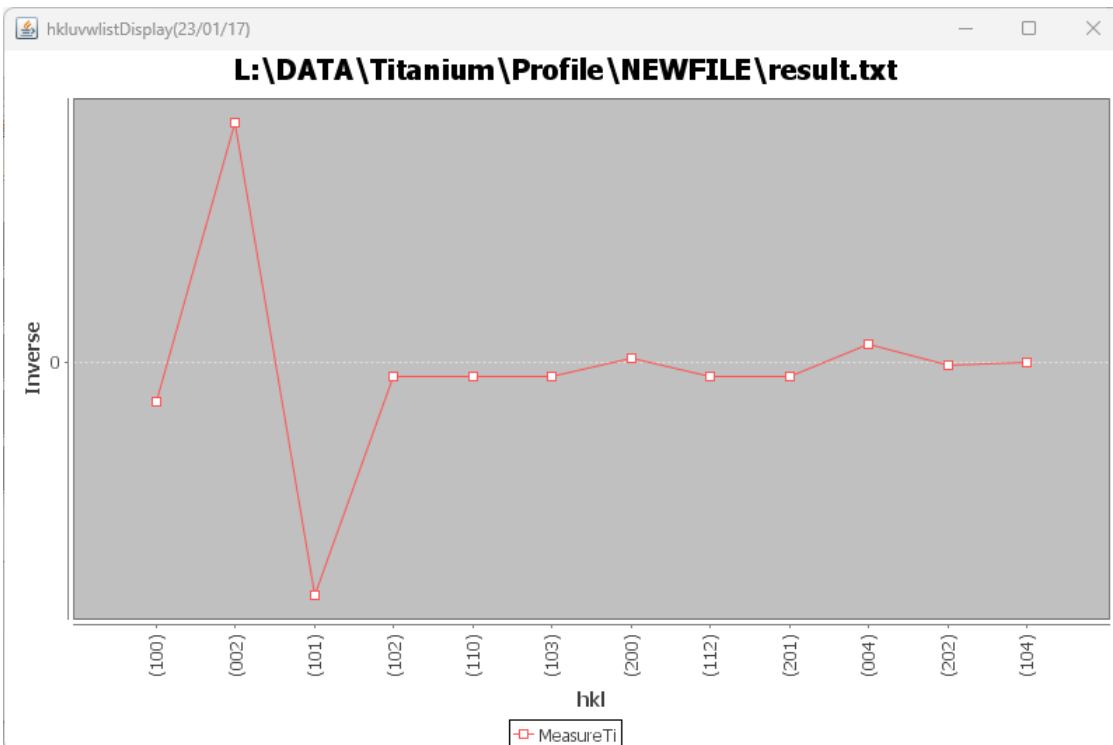
	(100)	(002)	(101)	(102)	(110)	(103)	(200)	(112)	(201)	(004)	(202)	(104)
MeasureTi	-0.11	0.68	-0.66	-0.04	-0.04	-0.04	0.01	-0.04	-0.04	0.05	-0.01	0.0

InverseResultDisplay 1.01T[23/03/31] by CTR

File Help

InputFile: L:\DATA\Titanium\Profile\NEWFILE\result.txt ListDisp

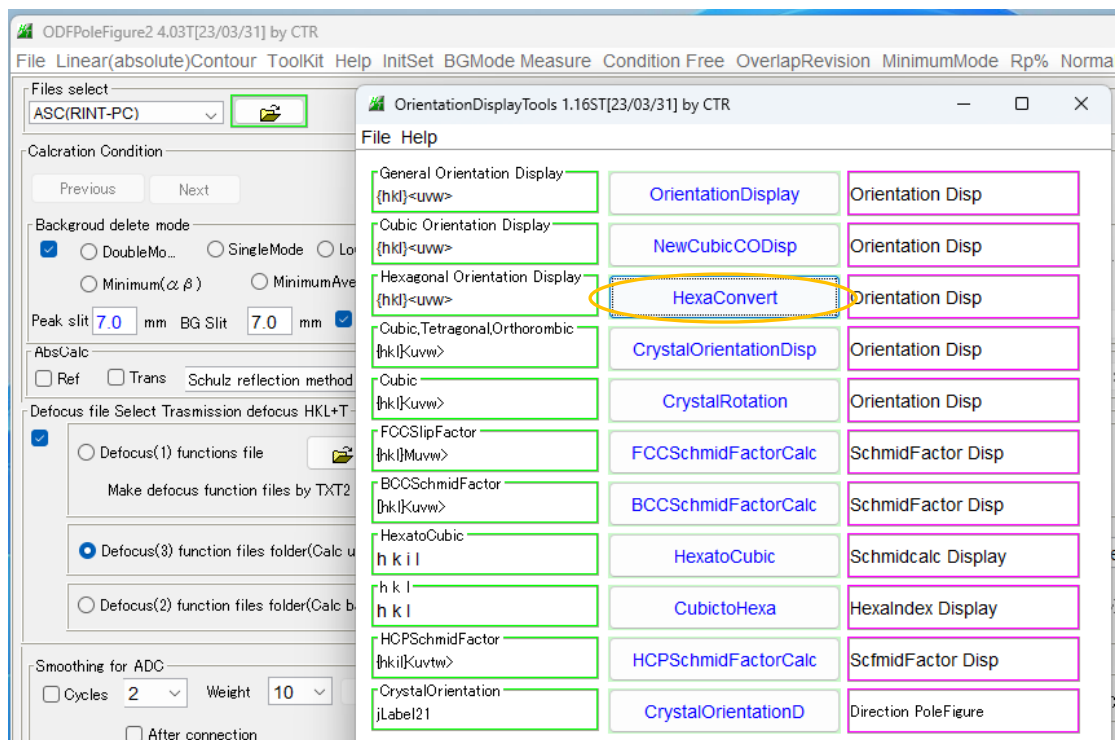
Comment: L:\DATA\Titanium\Profile\NEWFILE\result.txt Copyfile Display



## 7. Hexagonalの方位解析の基本

指数とeuler角度の関係

ODFPoleFigure → ToolKit → OrientationDisplay

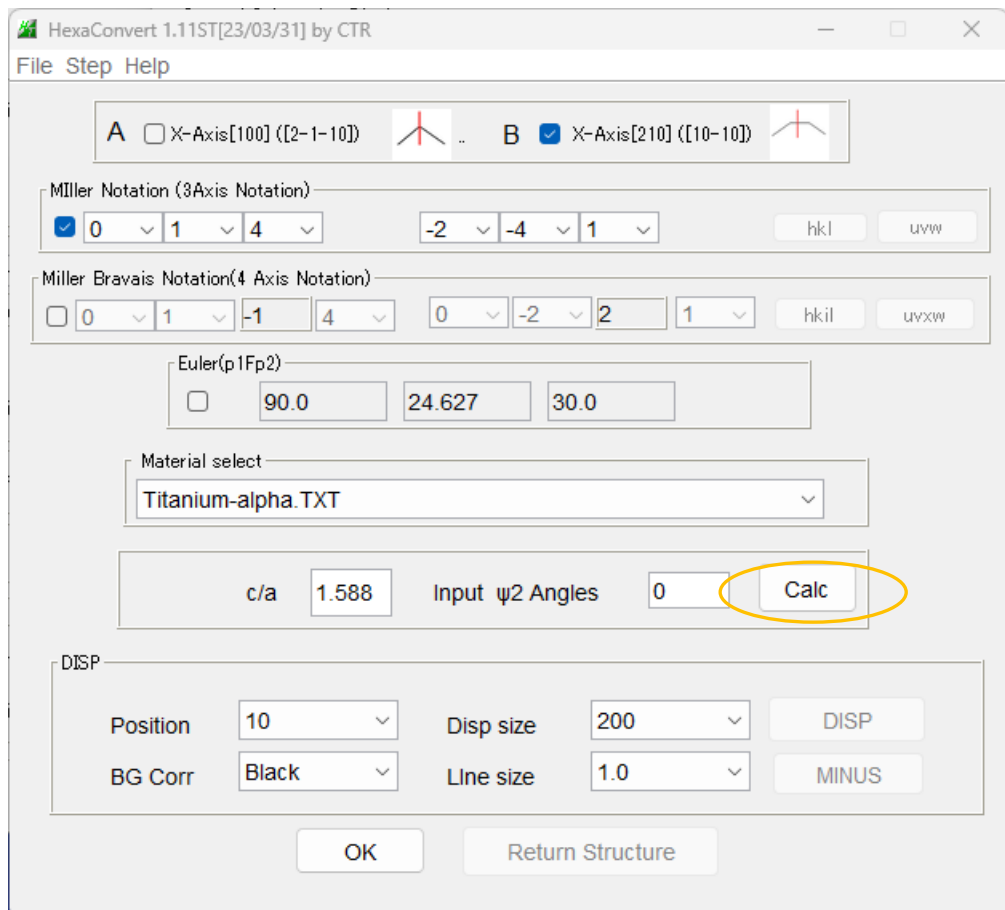


### HexaConvert

X軸  $[100] \leftrightarrow [210]$  切り替え

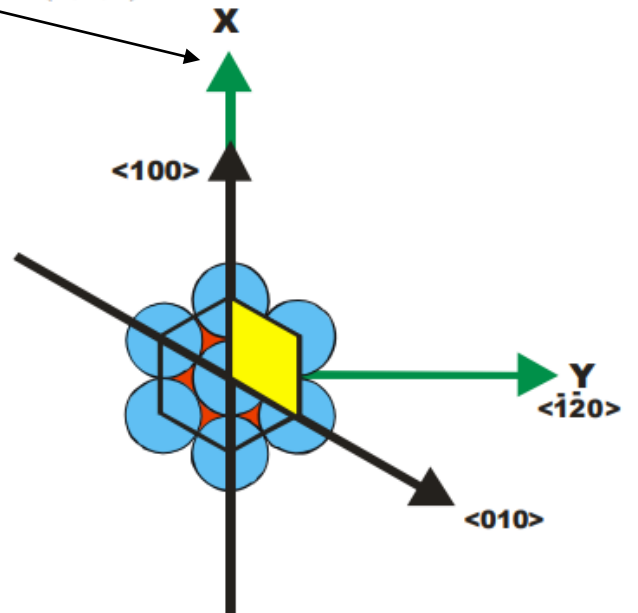
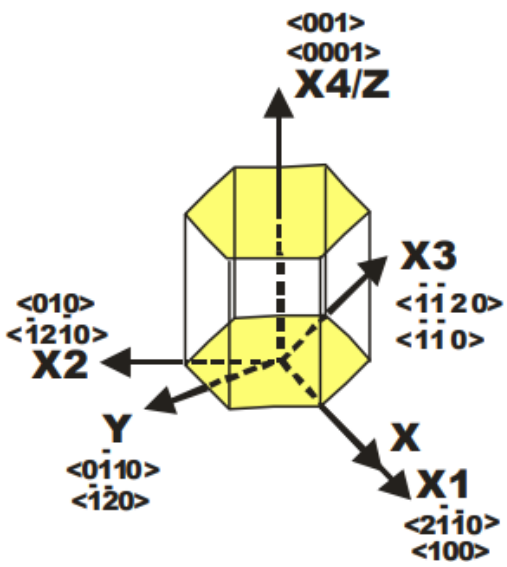
3指数  $\leftrightarrow$  4指数切り替え

euler角度計算、指数計算をサポート

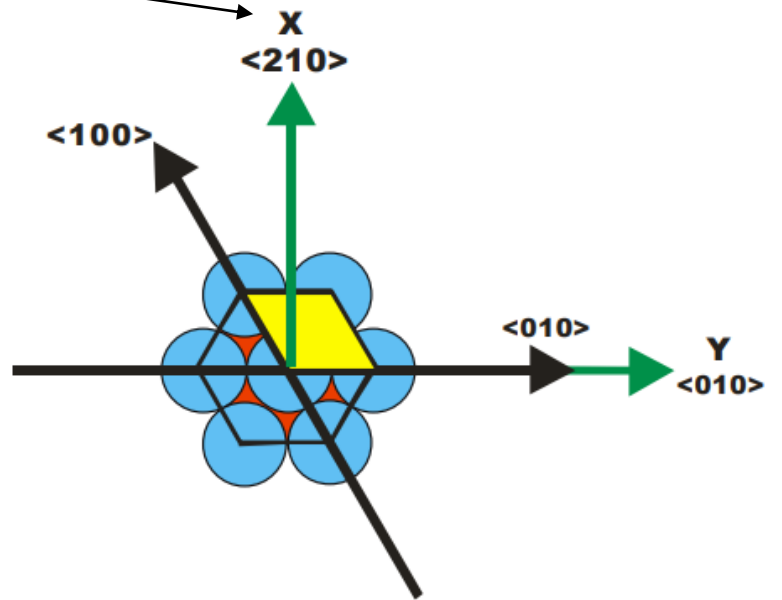
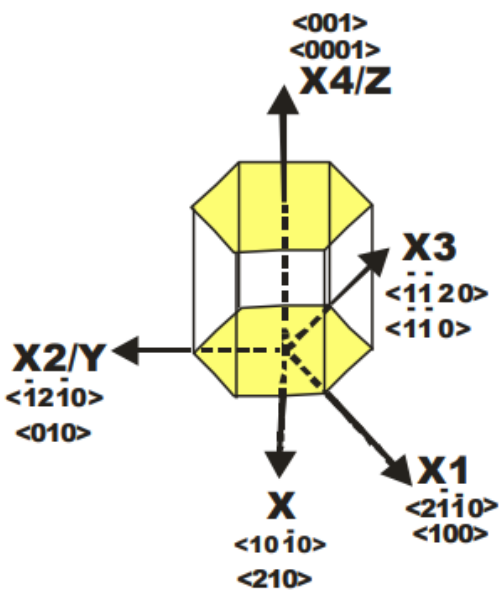


A  X-Axis[100] ([2-1-10])

Euler Angles (0,0,0)

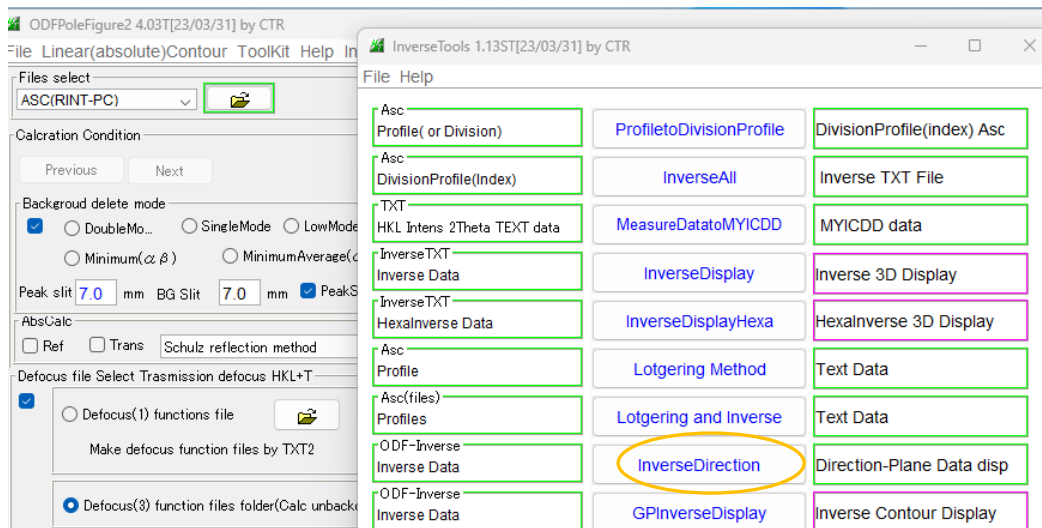


B  X-Axis[210] ([10-10])

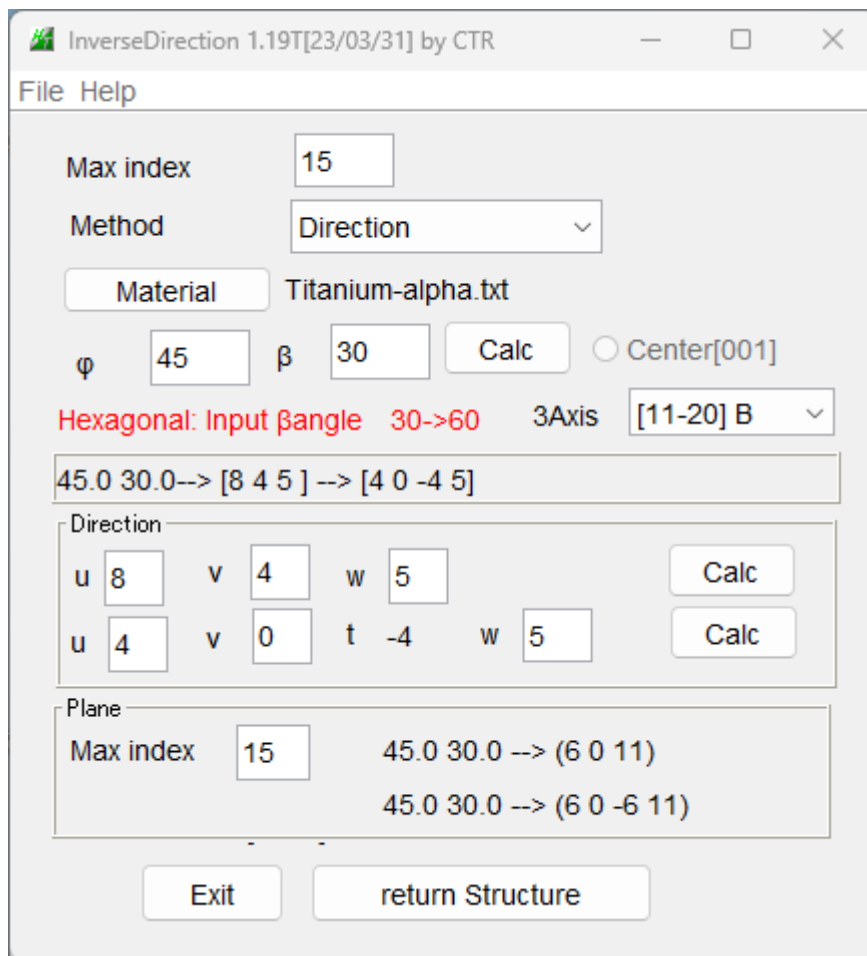


## 8. 逆極点方位

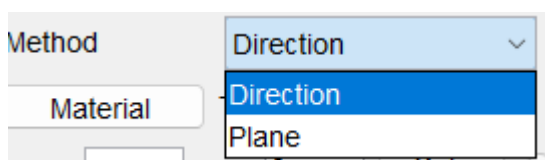
ODFPoleFigure -> Toolkit -> InverseTools

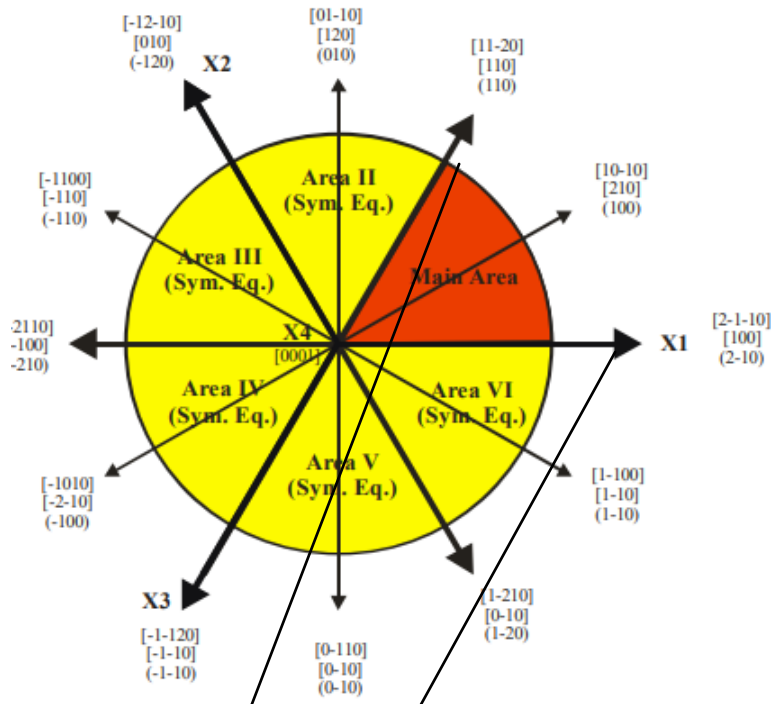


### 8. 1 逆極点上の位置に対する Direction, Plane 計算



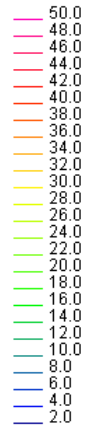
Direction <-> Plane





L:\DATA\Titanium\125-210-80P\ref\LaboTex\CWATI-INV.TPF  
RD

Max=50.74  
Min=0.0



GPIInverseDisplay 1.45T[23/03/31] by CTR

File Help Symmetry

Material: **MODE > [11-20]**

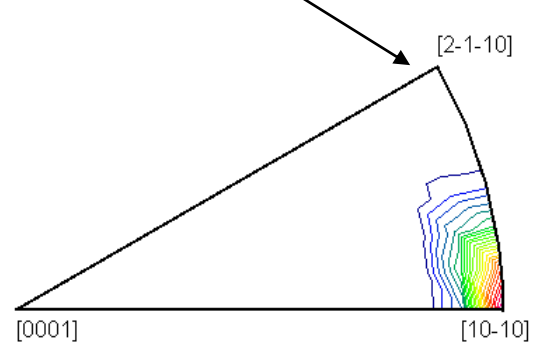
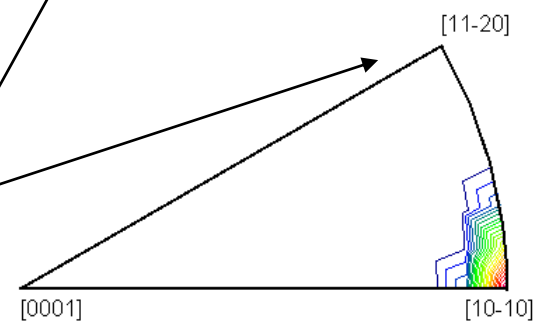
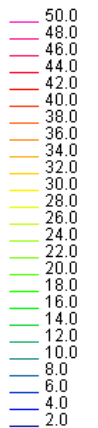
Titanium-alpha

ODF:  LaboTex  popL

Average

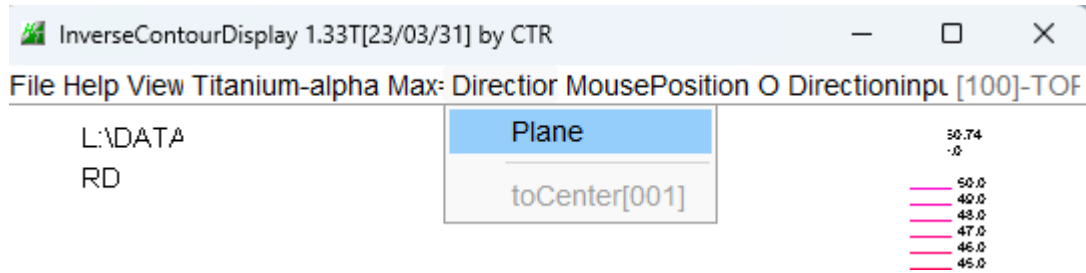
L:\DATA\Titanium\125-210-80P\ref\LaboTex\CWATI-INV.TPF  
RD

Max=50.74  
Min=0.0



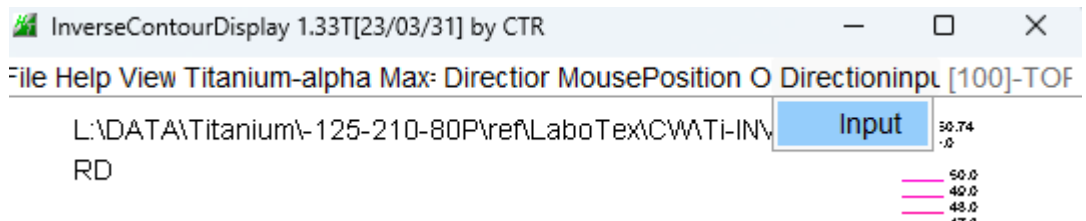
## 8. 2 Direction <-> Plane 切り替え

指数表示を切り替える

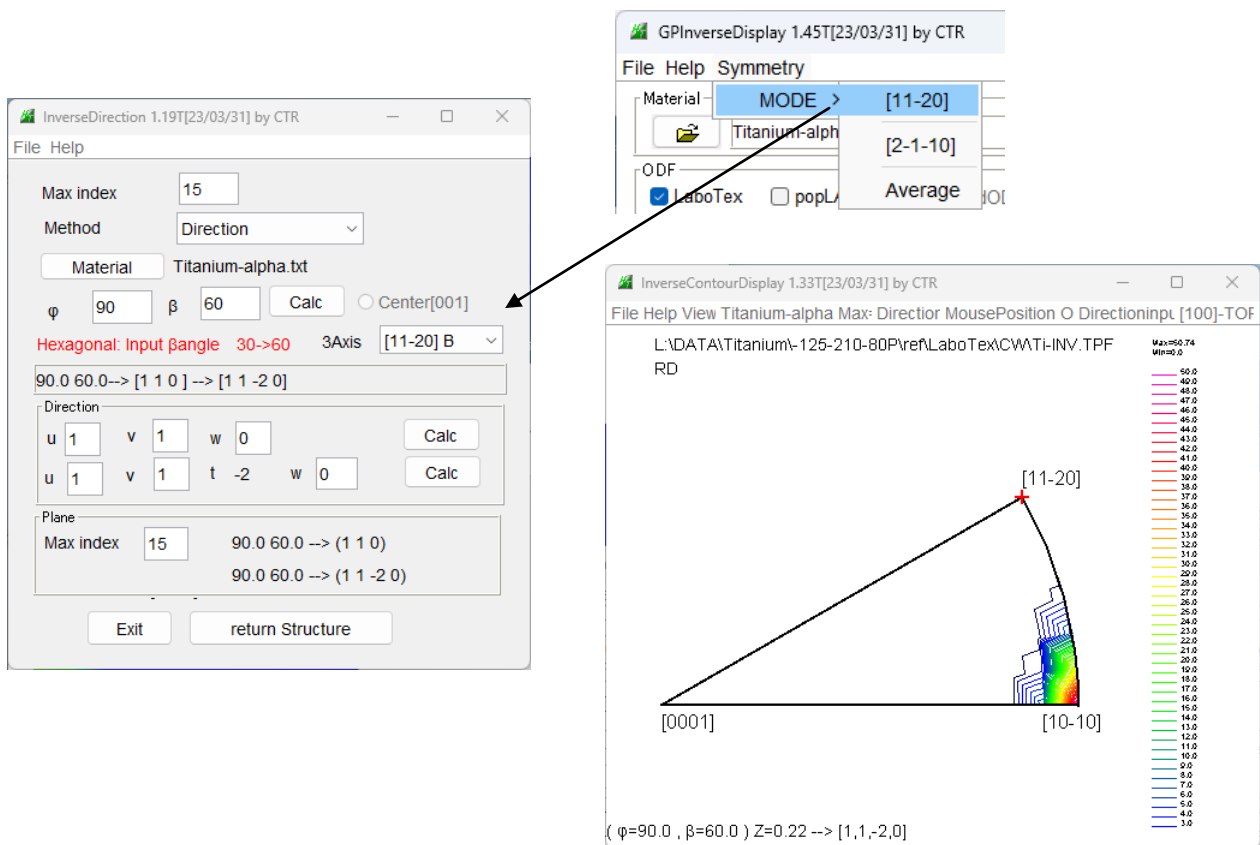


## 8. 3 方位入力

指数入力はマウスクリックと手入力、手入力は以下

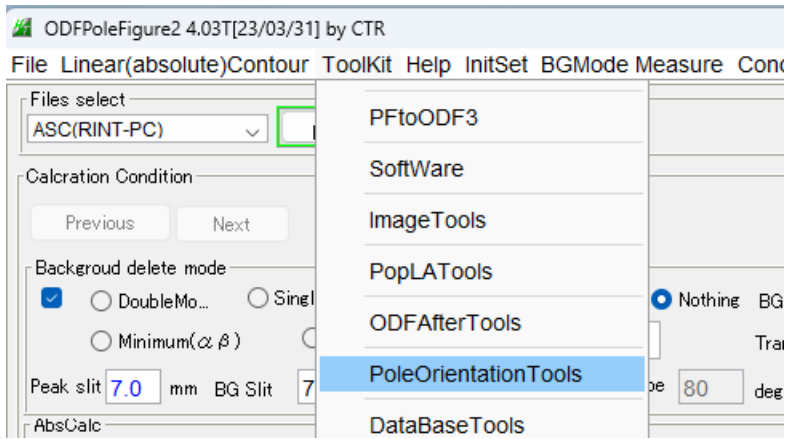


[0001]-[10-10]-[11-20] と [0001]-[10-10]-[2-1-10] 切り替え

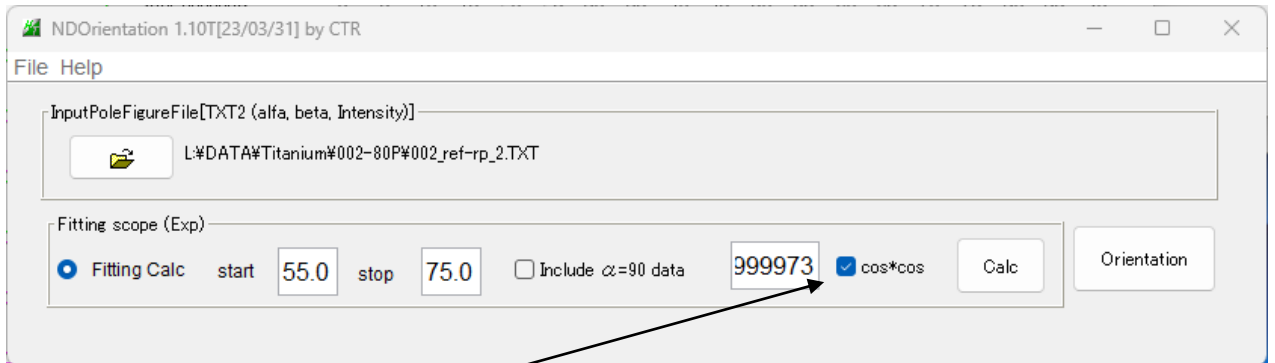
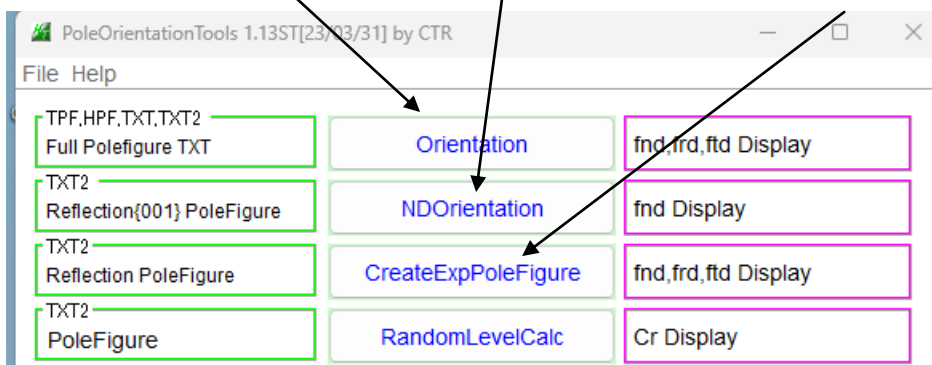


9. 反射 {001} 極点図から配向関数計算 (Cubicは除く)

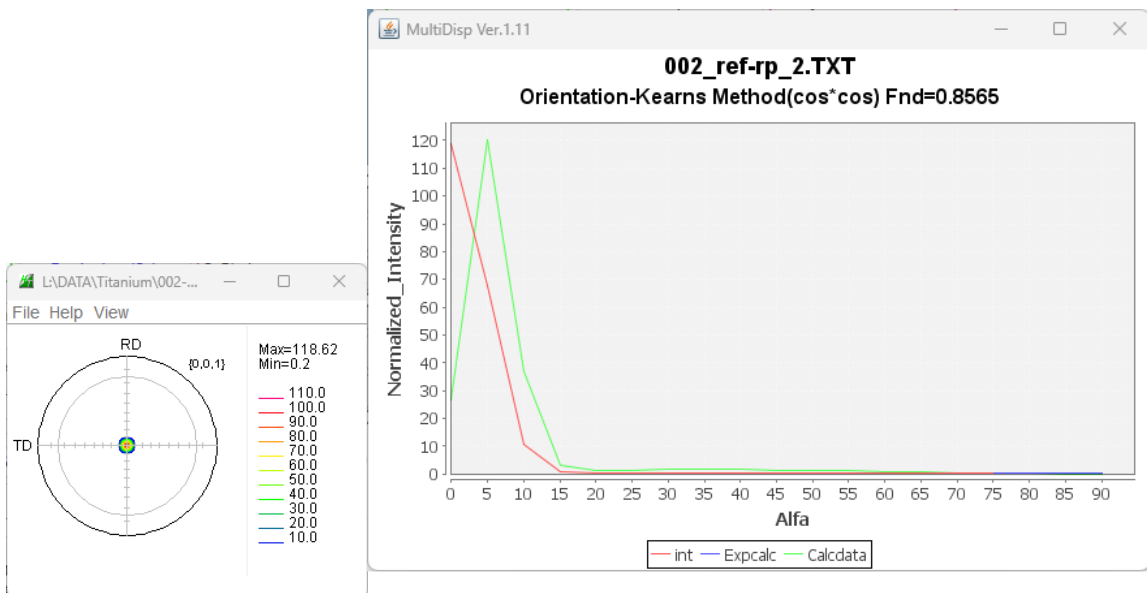
バックグラウンド削除、defocus補正を行った反射極点図より配向関数計算



配向関数計算 完全極点図、反射極点図 (中心に極)、反射極点図 (中心近傍) の計算



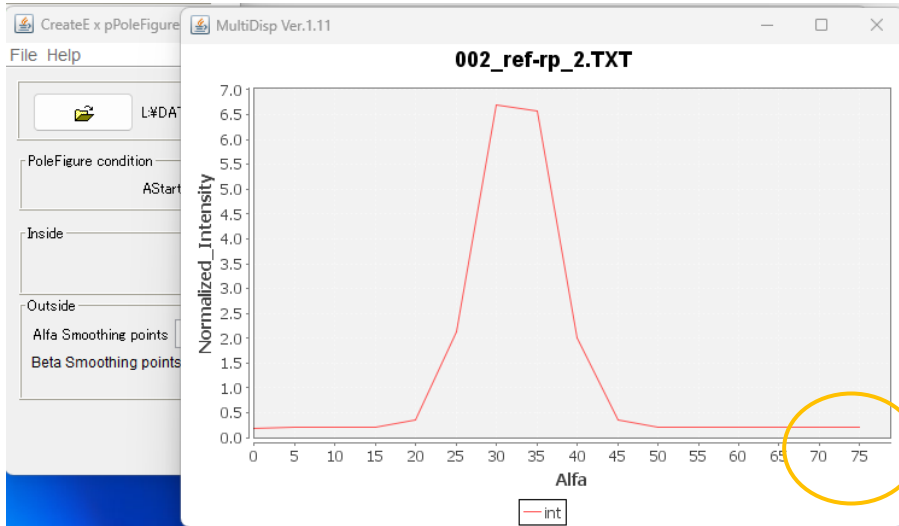
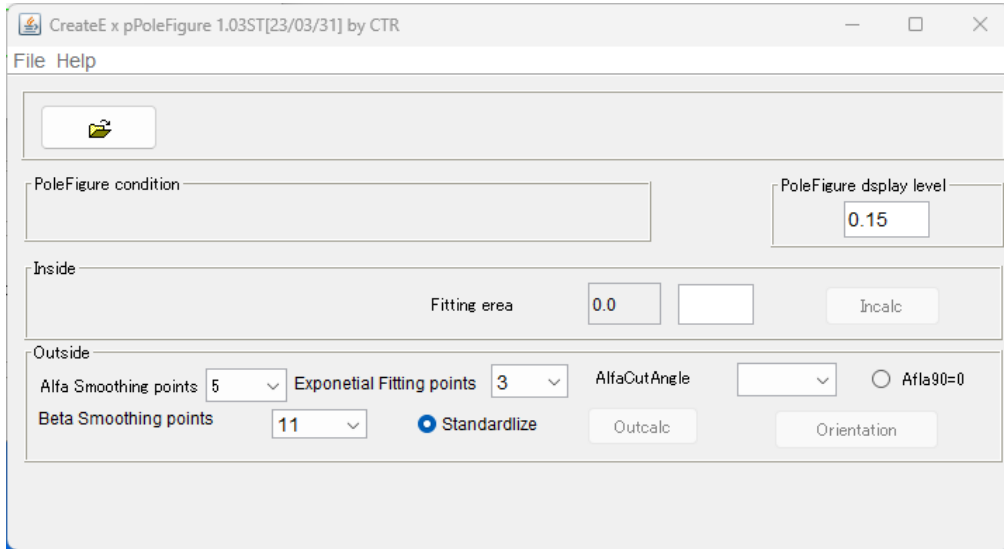
計算方法は2種類選択



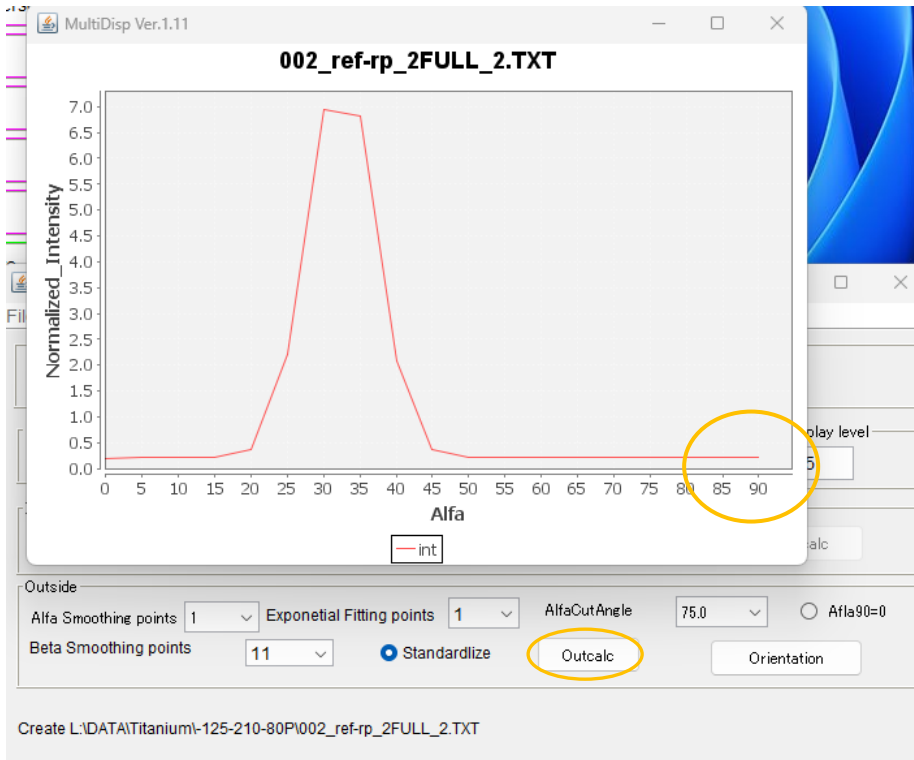


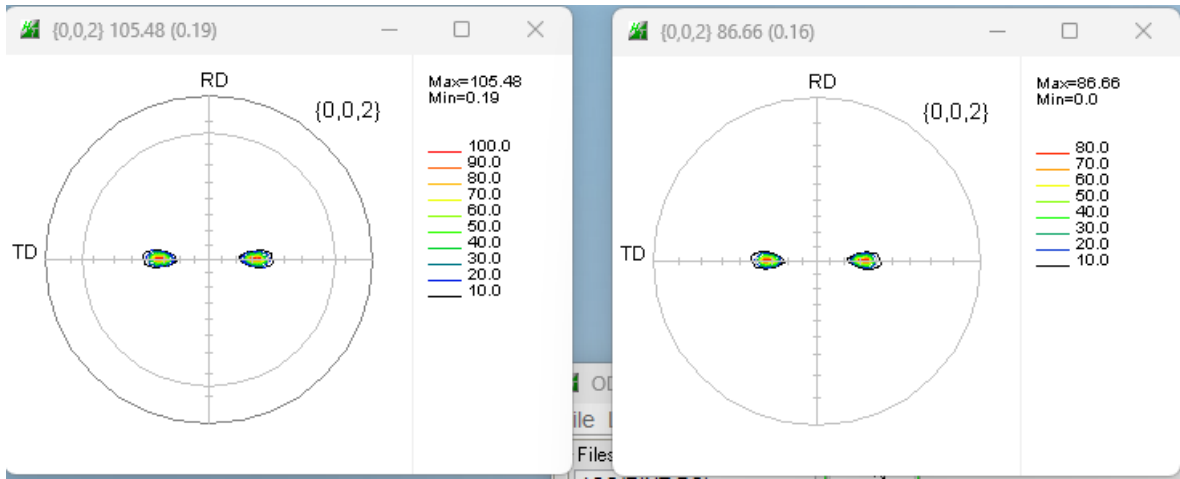
10. 極が中心付近に存在する反射極点図の配向関数 (Cubicは除く)

反射極点図選択

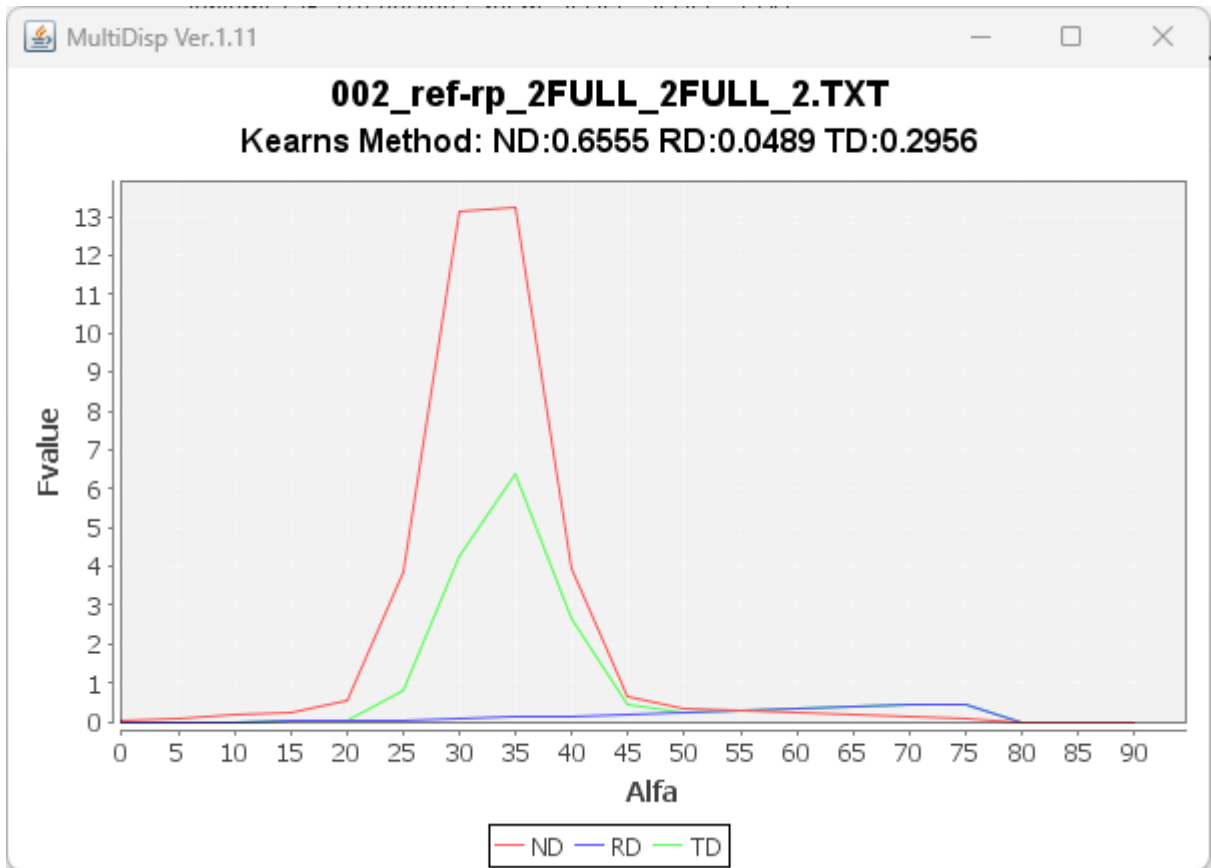


極点図の外側を外挿





反射極点から完全極点図 作成された TXT2 ファイルを選択



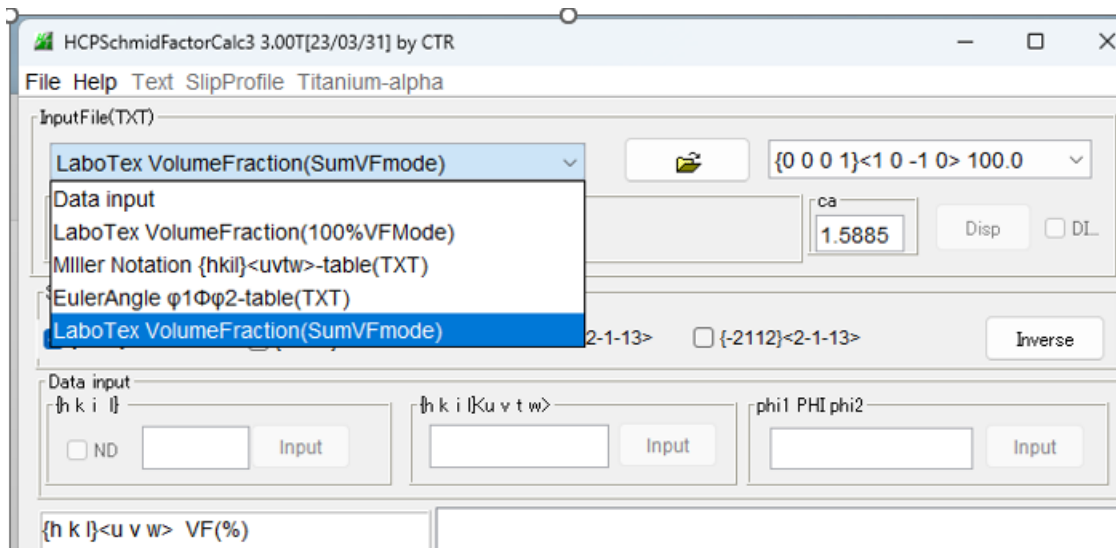
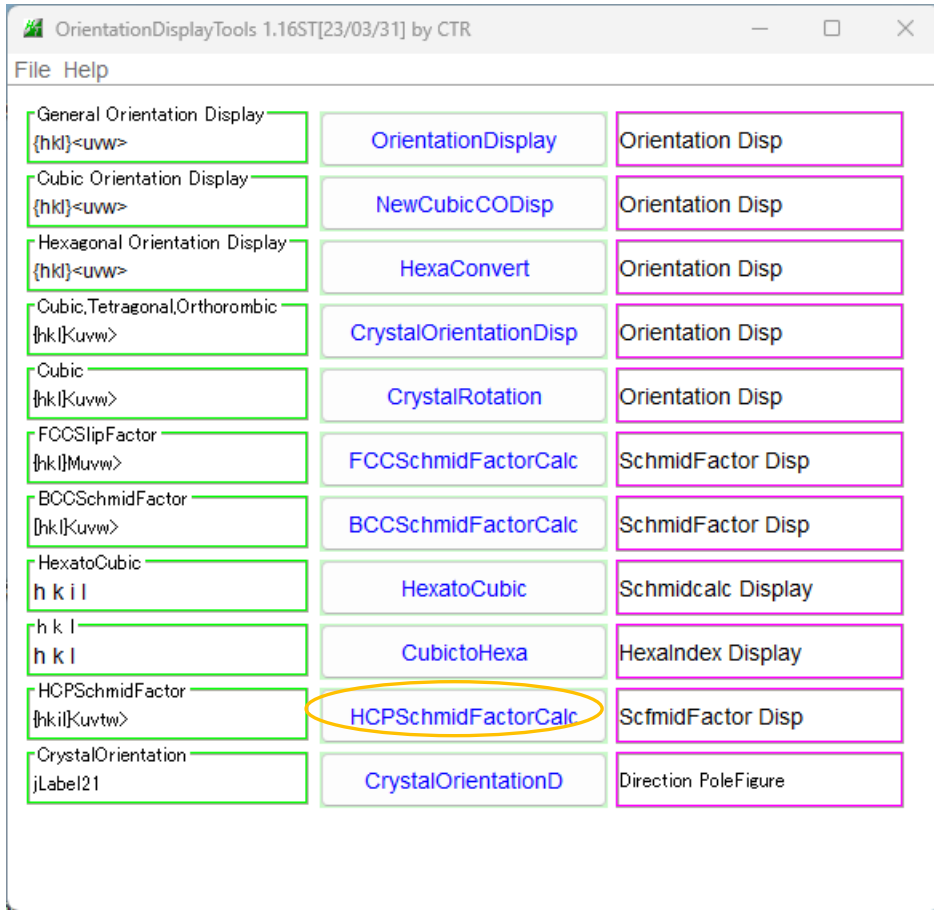
配向関数が計算される。

オリジナル

Kearns Factors (Fraction in Physical Property)		
LD	TD	ND
0.0681	0.3041	0.6278
$f_L$	$f_T$	$f_N$

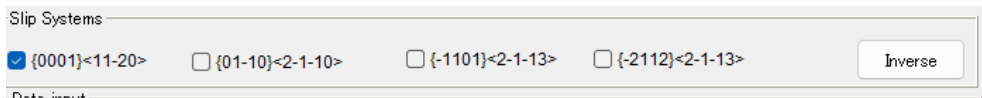
# 11. HCPのSchmid因子を計算

ODFPoleFigure->ToolKit->OrientationDisplayTools

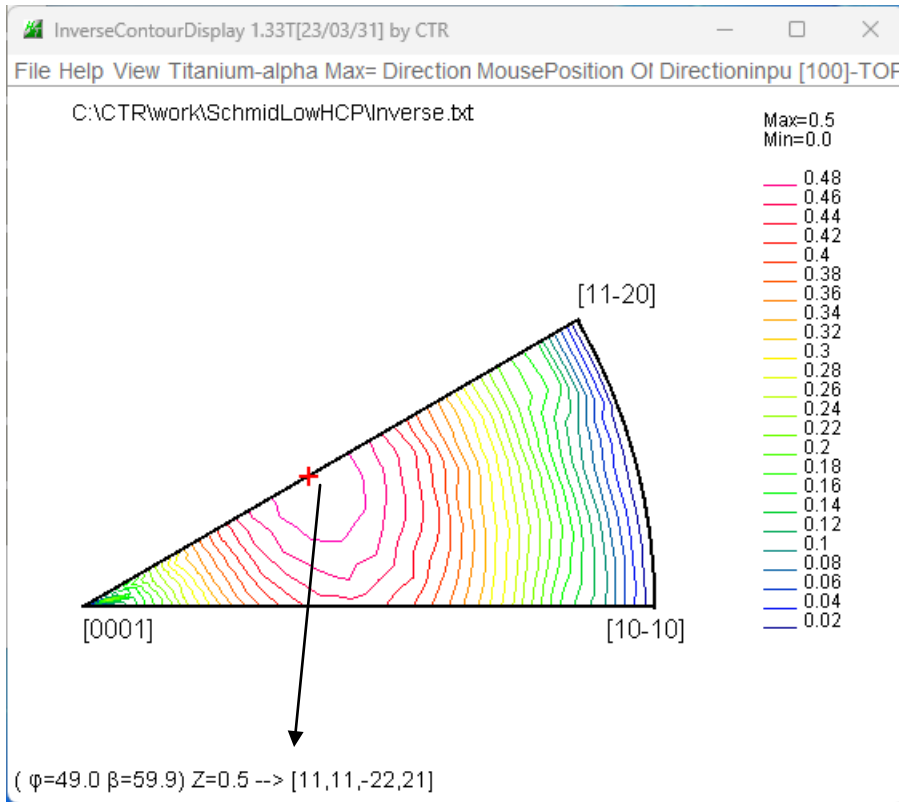


LaboTexのVolumeFraction結果から計算  
手入力による計算  
をサポート

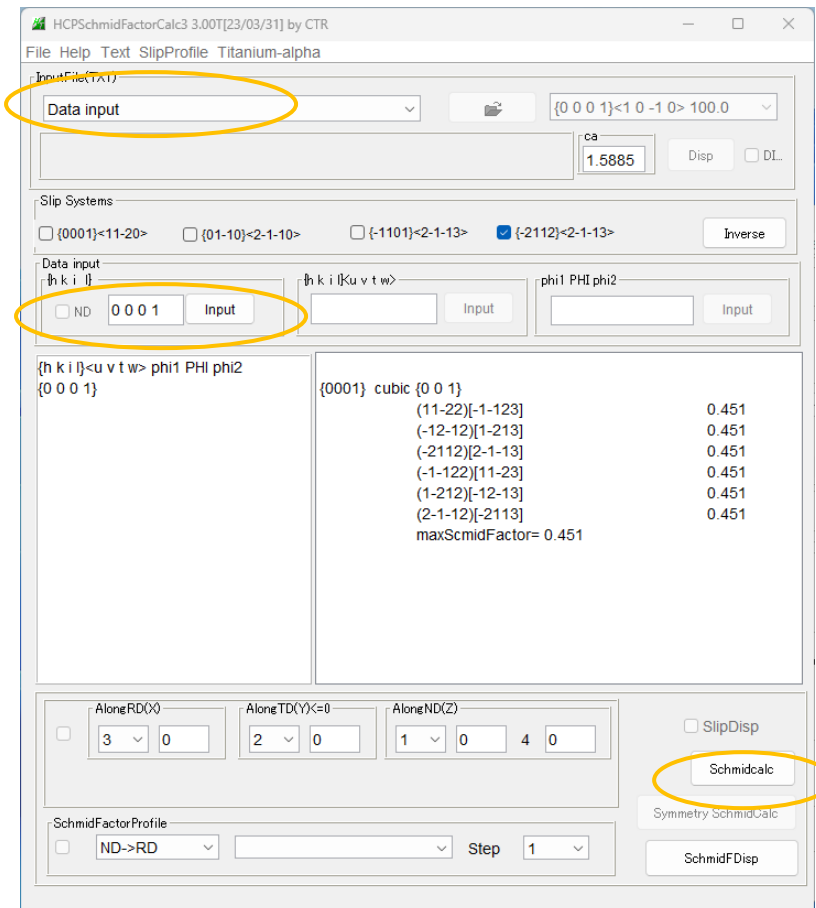
### 1 1 . 1 S l i p システムによる方位シュミレーション



ステレオ三角形をマウスクリックで方位計算

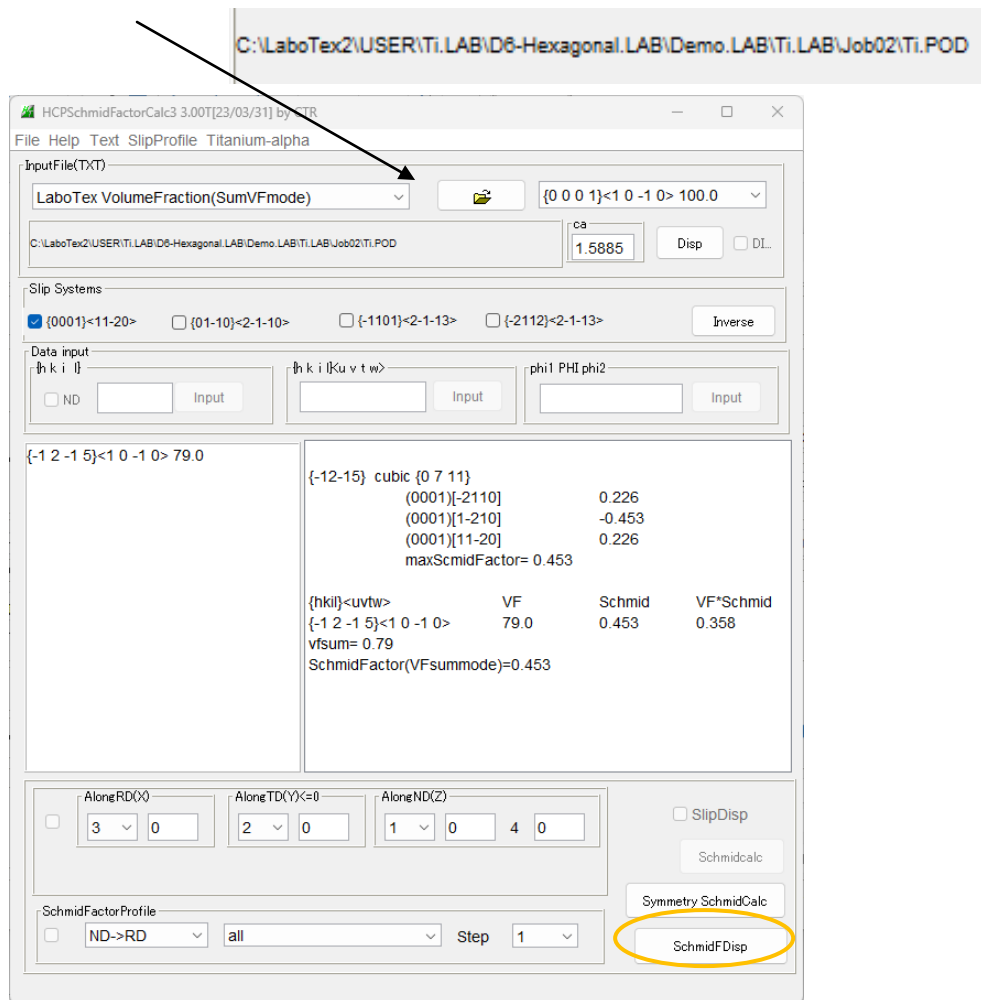


### 1 1 . 2 方位手入力

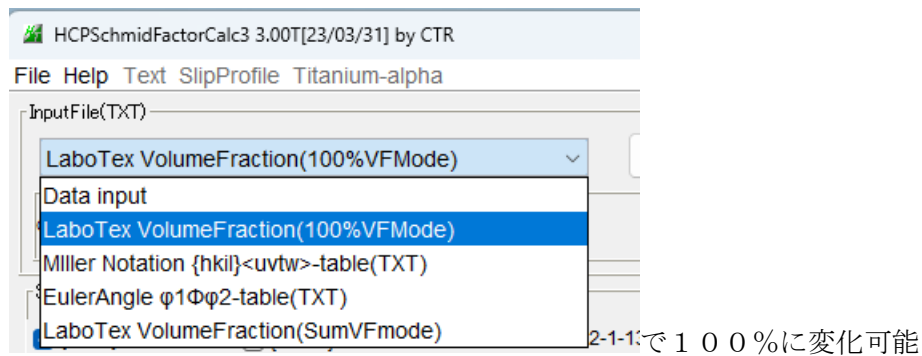


手入力による  
S c h m i d 因子計算

1.1.2 LaboTex計算のVolume Fractionを入力  
 入力データ LaboTex の VF%計算結果



方位をCubic指数に変換し計算



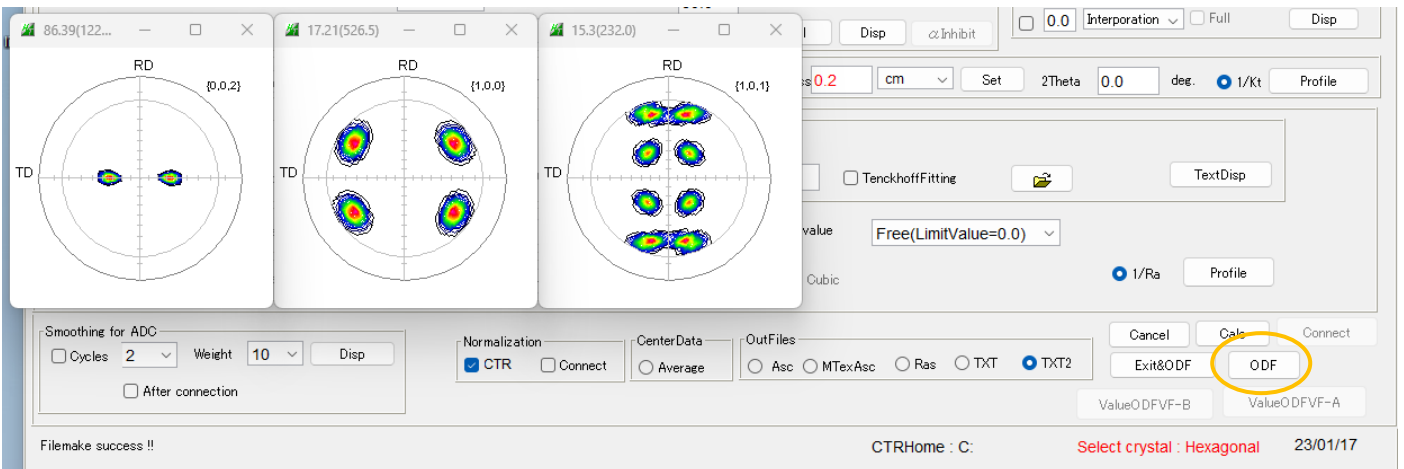
## 12. ODF 解析

ODFPoleFigure2による測定データ処理

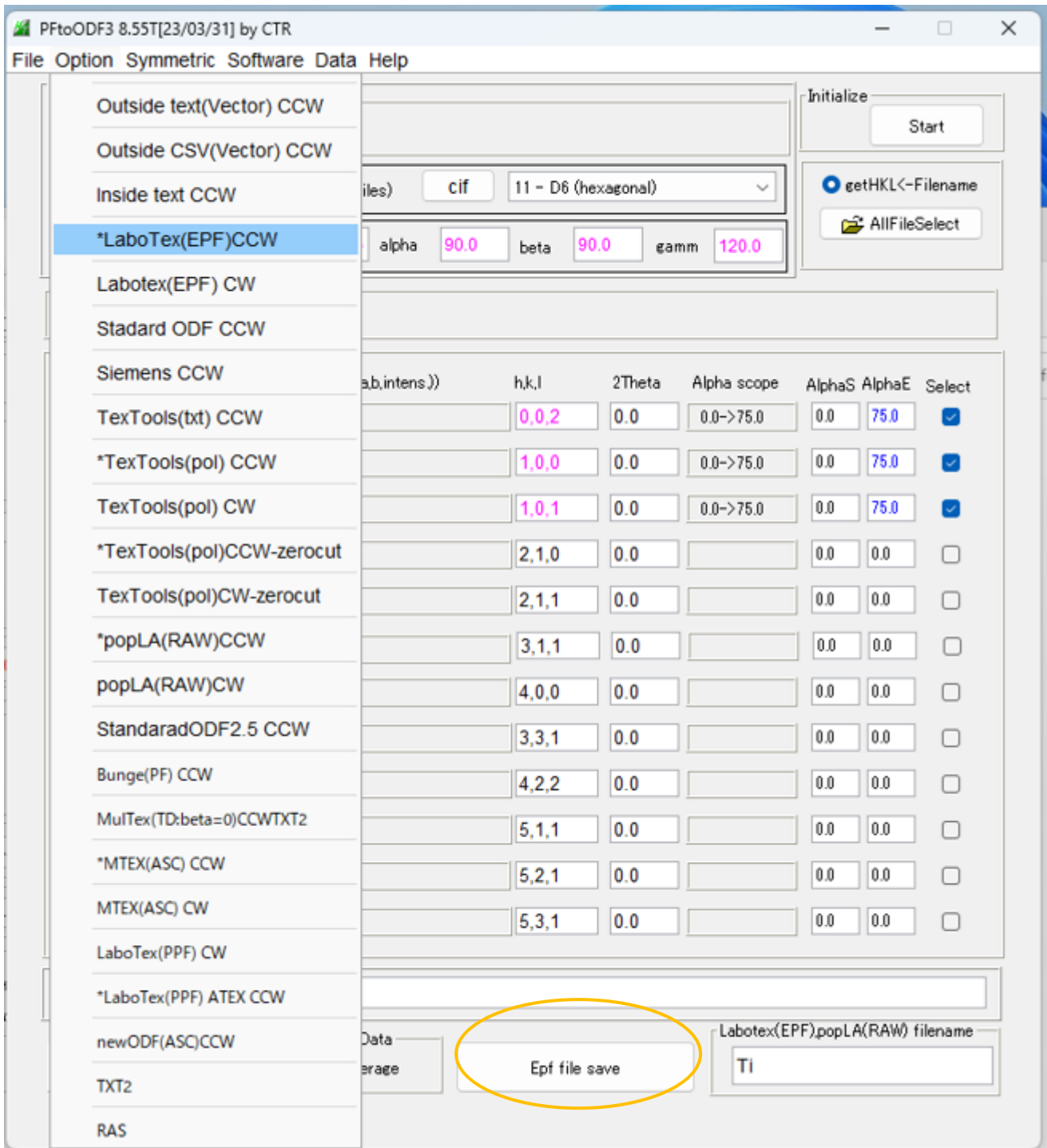
バックグラウンド削除、defocus補正、規格化を行う。



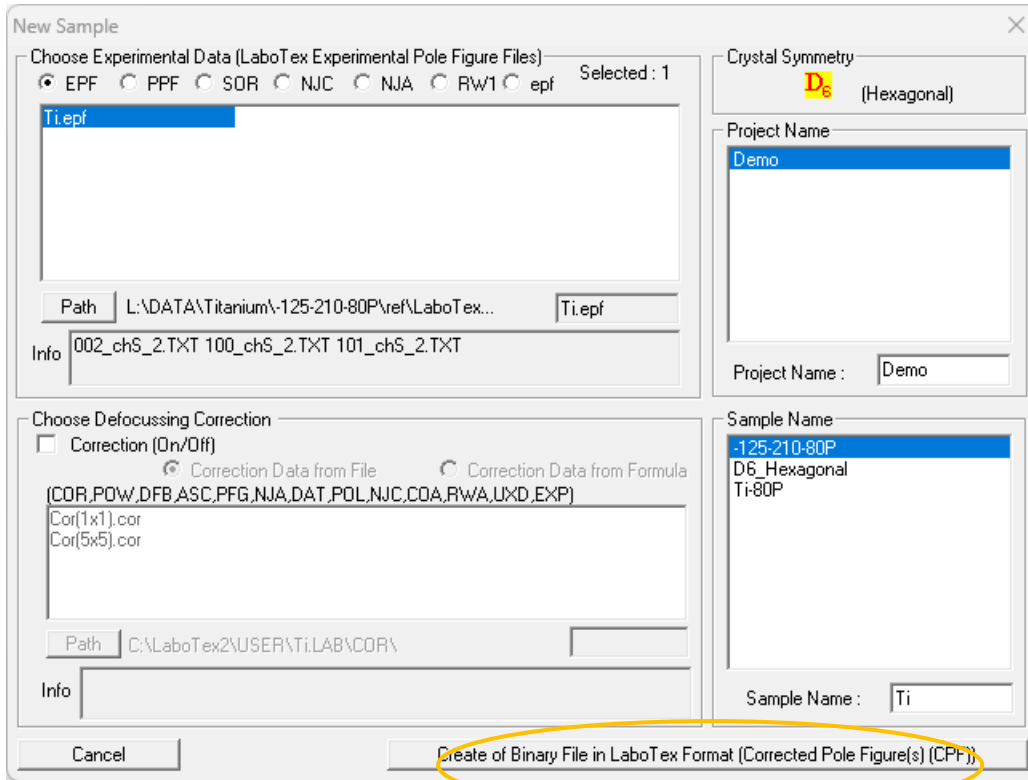
ODF 向け反射極点データ作成 (中心から75度データ)



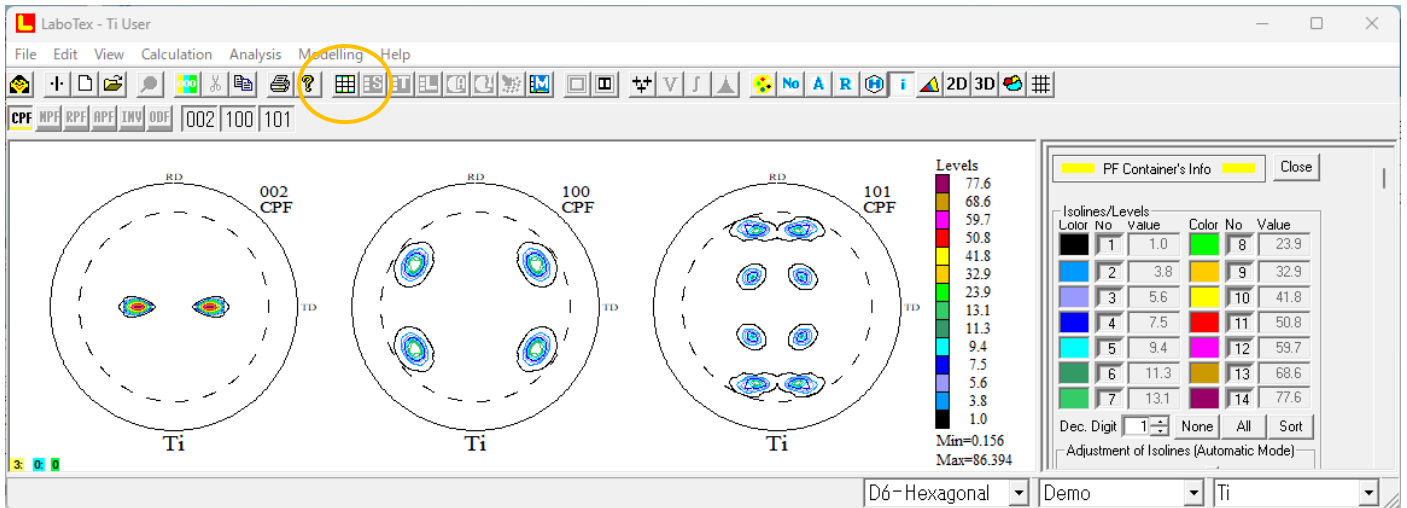
12.1 LaboTex向けデータ作成  
LaboTex以外に多数のODF選択可能



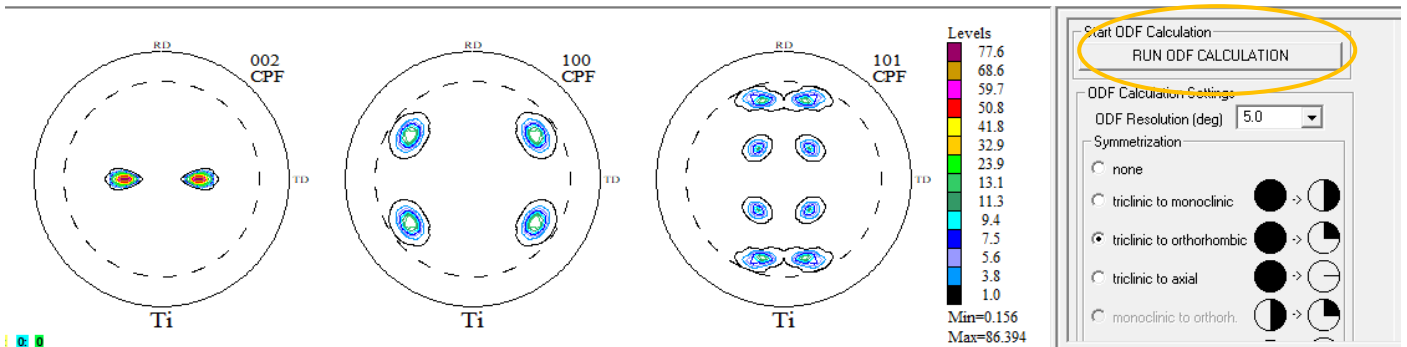
## 1 2 . 2 LaboTex で読み込みODF解析



入力極点図からODF解析開始

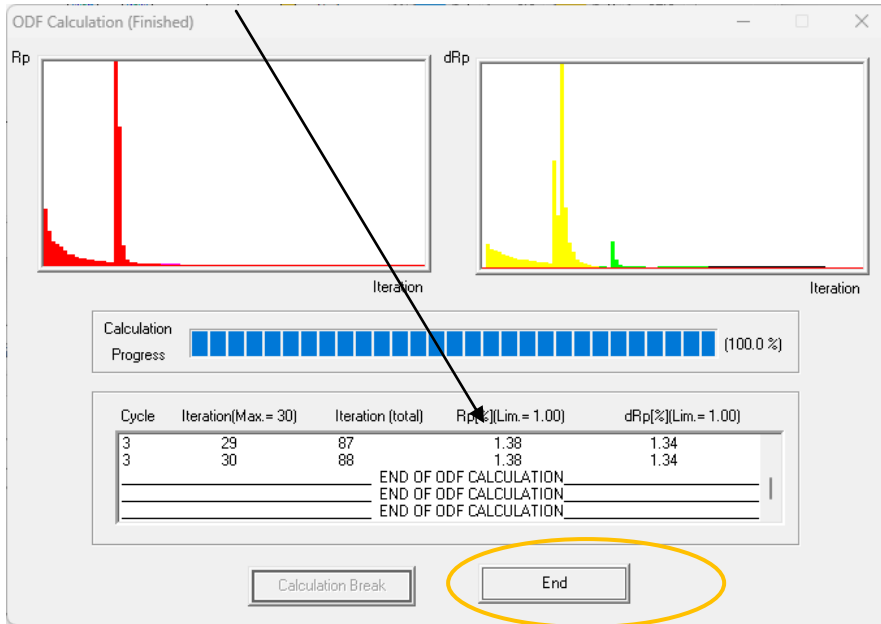


## 1 2 . 3 ODF解析

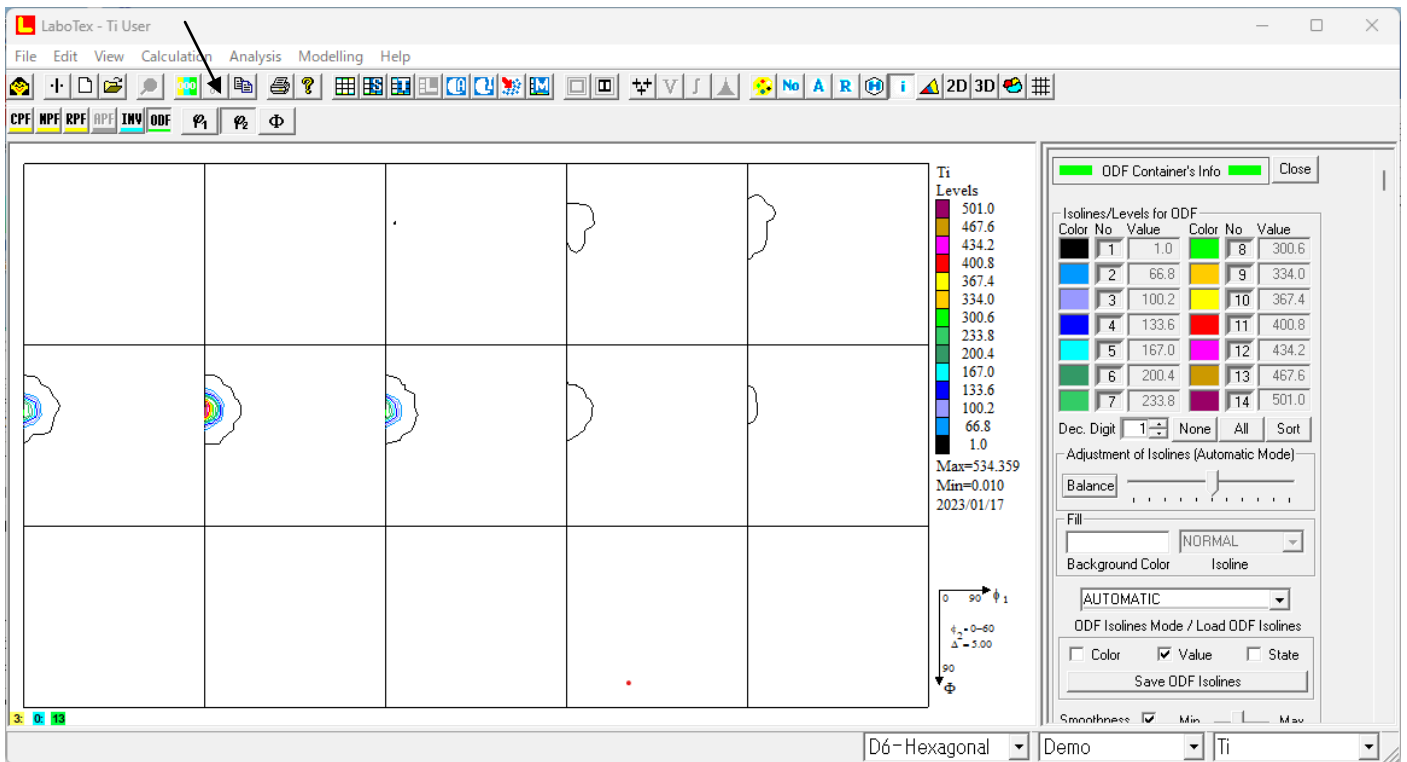




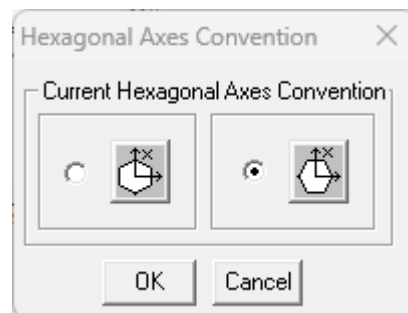
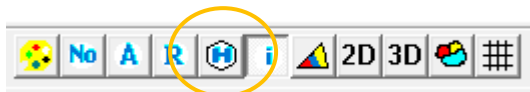
R p %が確認出来ます、



ODF → φ2 選択

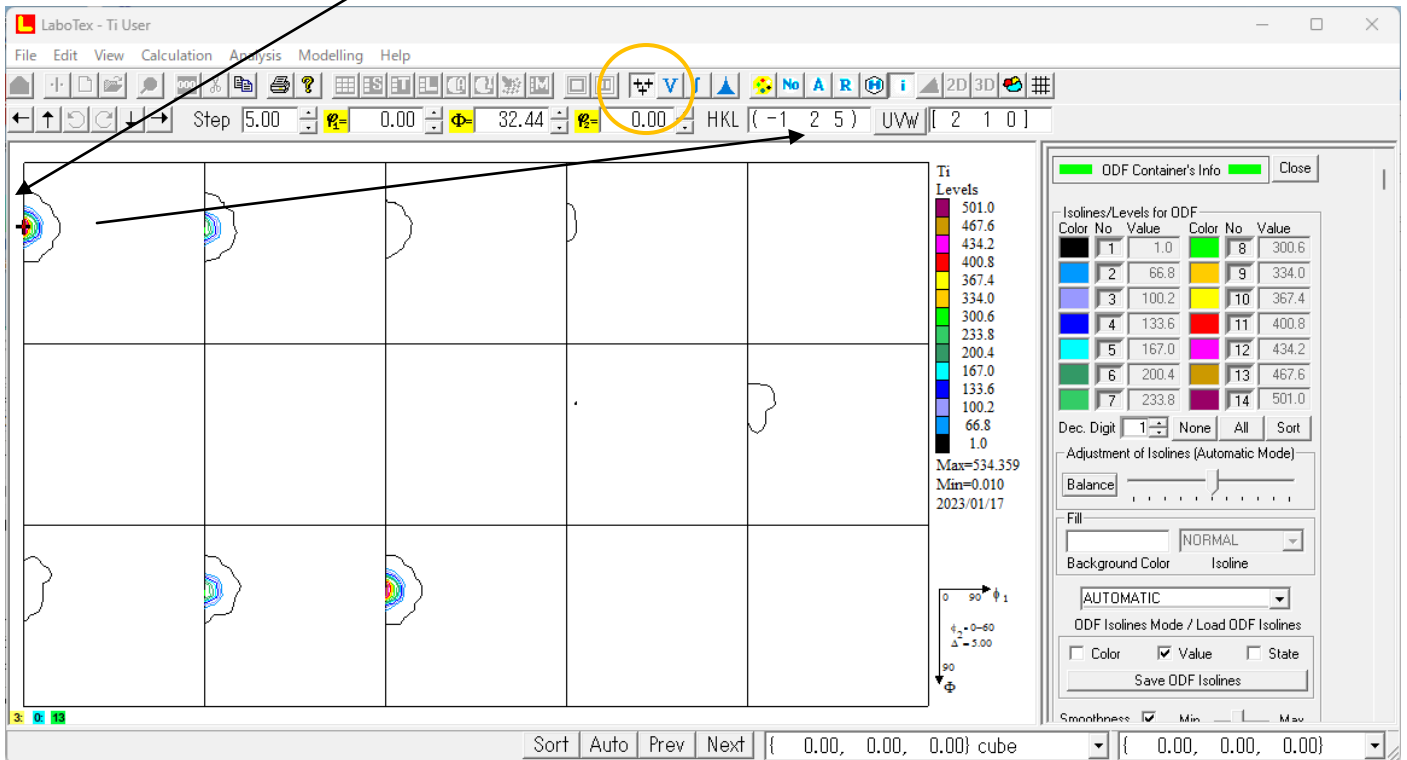


X 軸変更

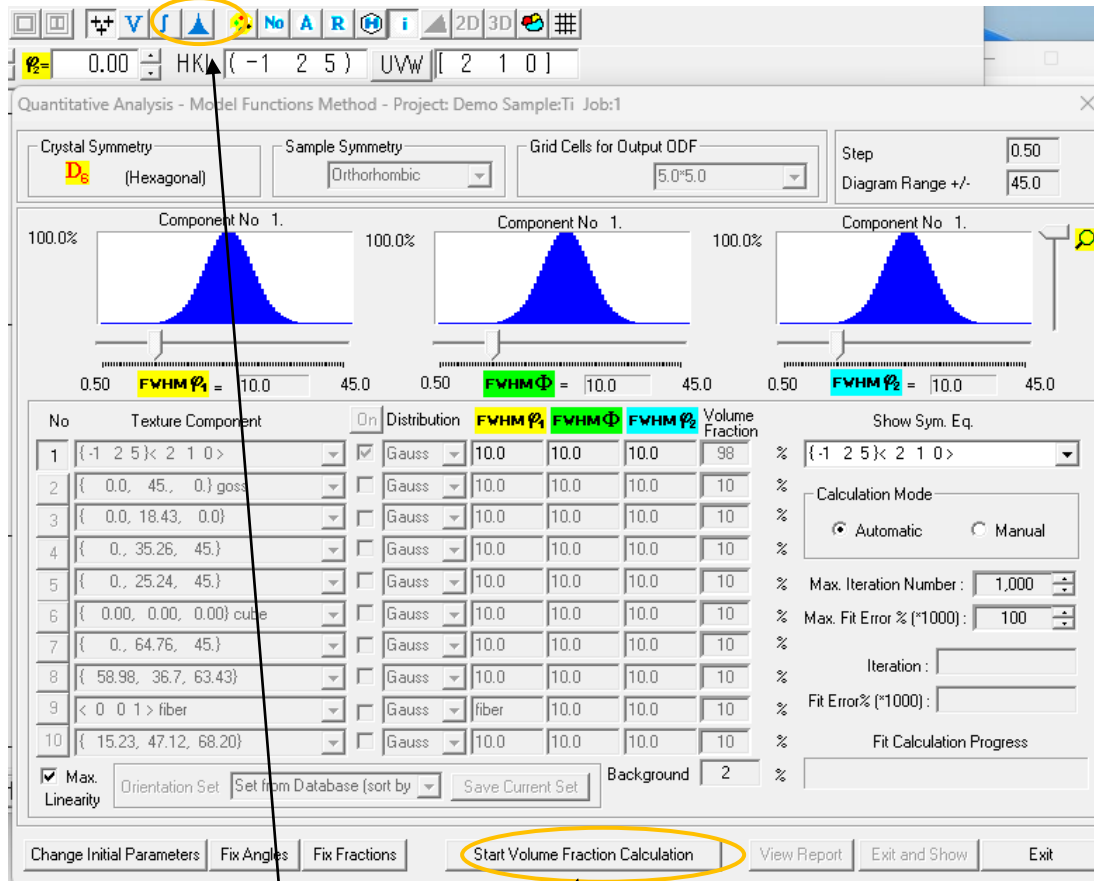


## 12.4 方位の決定

マウスでODF画面上をクリック



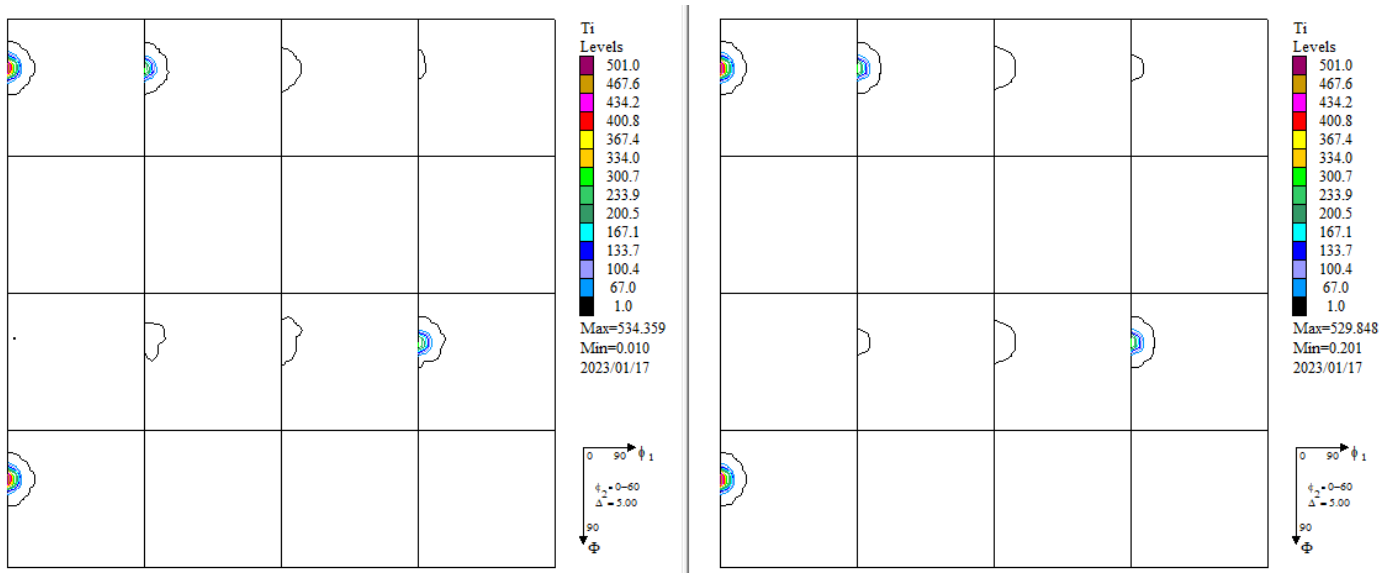
マウスクリックにより方位が計算される



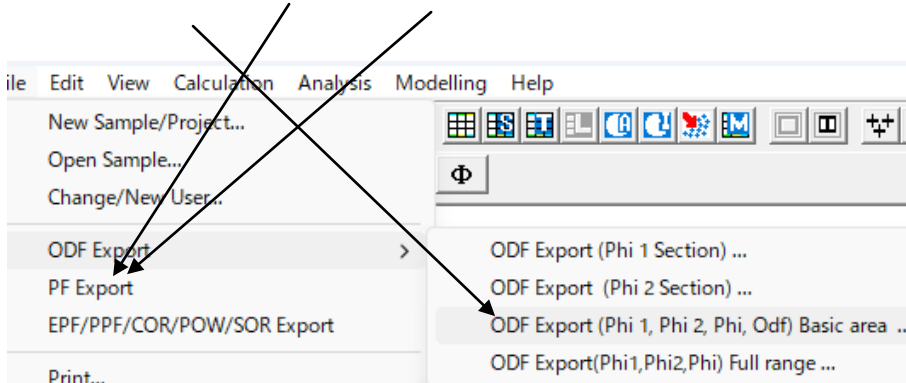
マウスクリックによりVolume Fraction (VF%) 画面が表示  
VF%計算開始



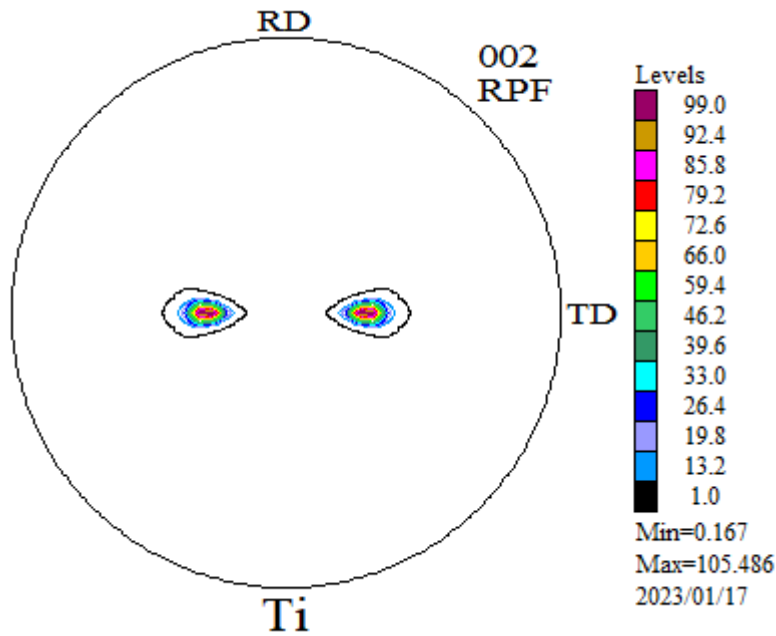
{-1 2 5} < 2 1 0 >が80%、randomが20%と計算されました。  
Exit Showで計算されたODF図を表示



計算した ODF 図、極点図、逆極点図を Export



1.3. 底面 {001} から配向関数計算



Calculation of Anisotropy Factors

Calculation for Hexagonal, Tetragonal and Orthorhombic Crystal Systems

Fraction of Basal Planes {001} in Sample Directions

LD	TD	ND
0.1496	0.3313	0.5191
f1	f2	f3

Angles between Basal Planes {001} and Sample Directions

LD	TD	ND
74.9	56.5	37.6
a	b	c

Kearns Factors (Fraction in Physical Property)

LD	TD	ND
0.0679	0.3040	0.6281
fL	fT	fN

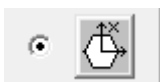
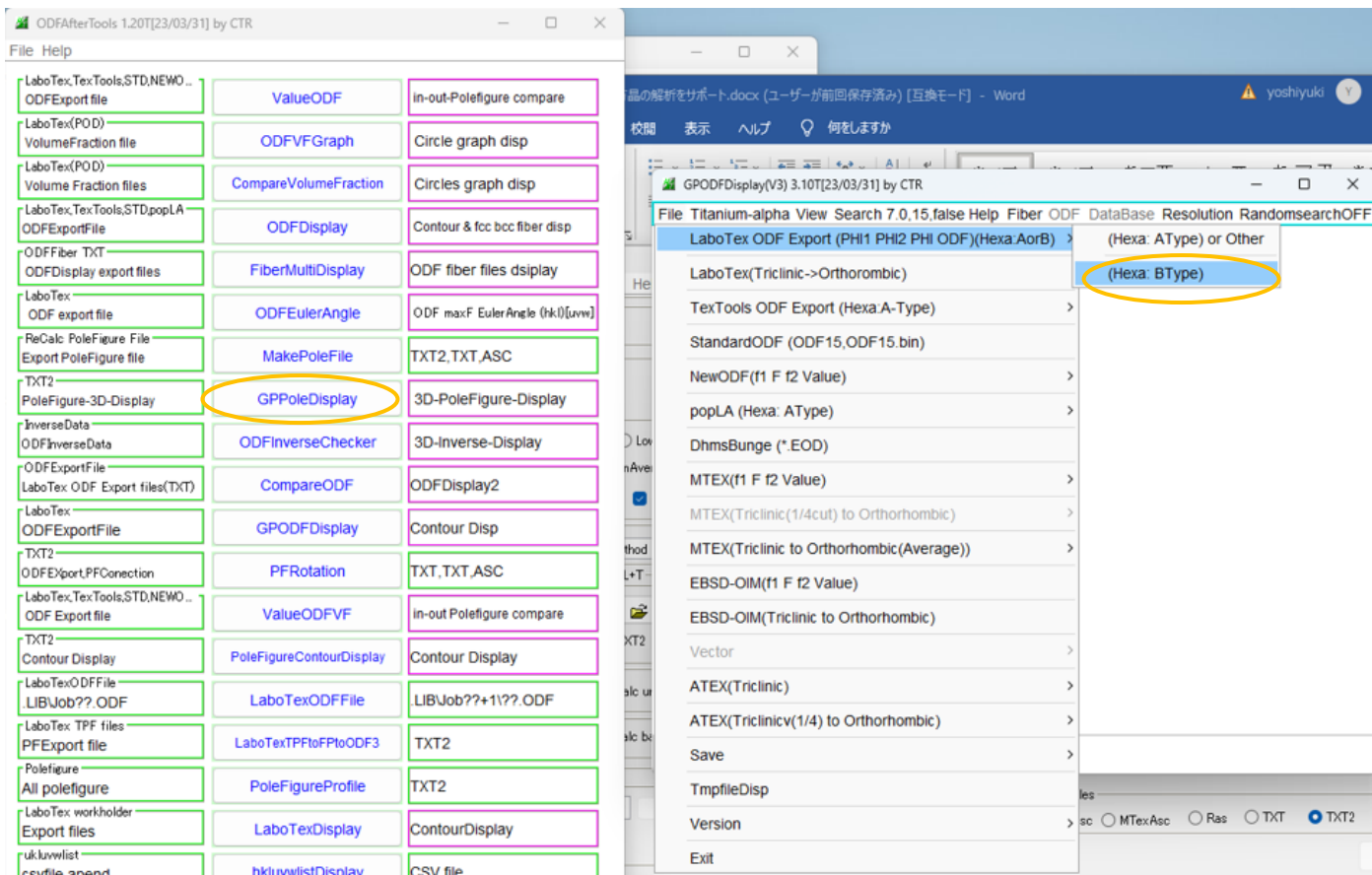
Texture Index (F2) (normalized) 0.99166  
("0" - Random, "1" - Monocrystal)

Calculate

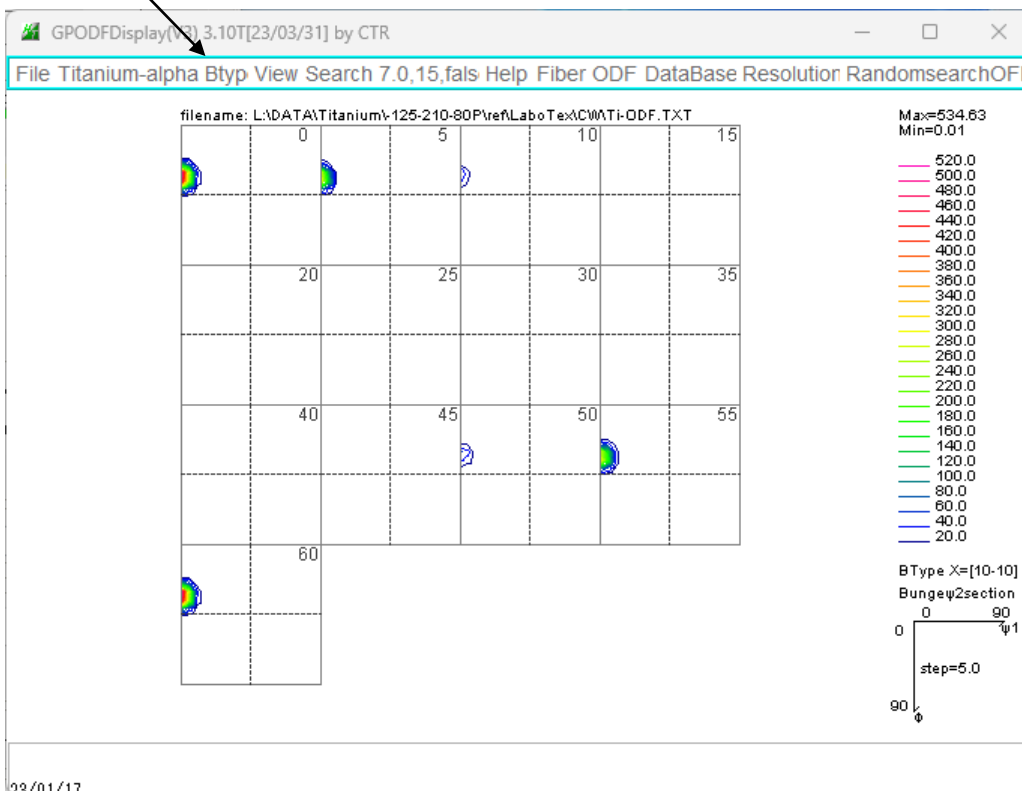
End

# 14. ExportしたODF図をGPODFDisplayで解析

ODFPoleFigure → ODFAfterTools

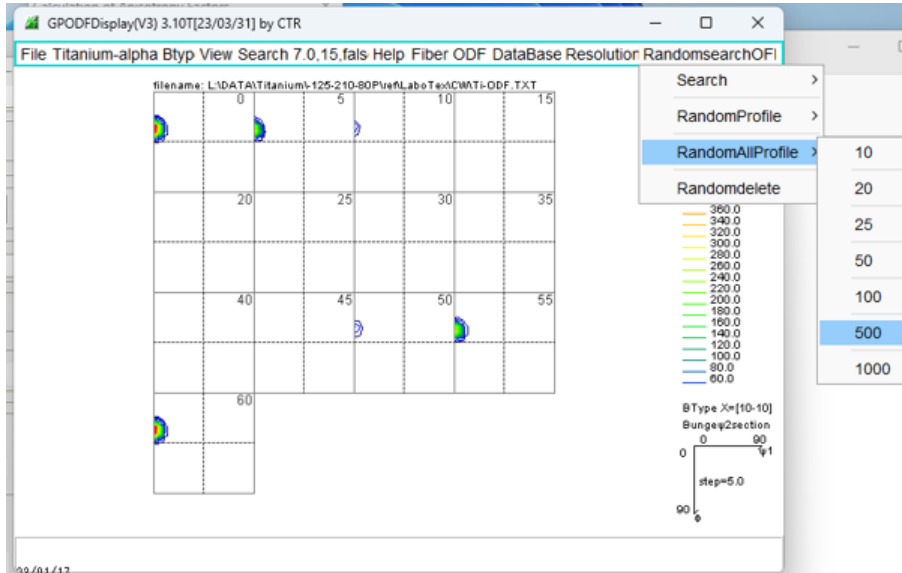


B-Typeで解析を行う。

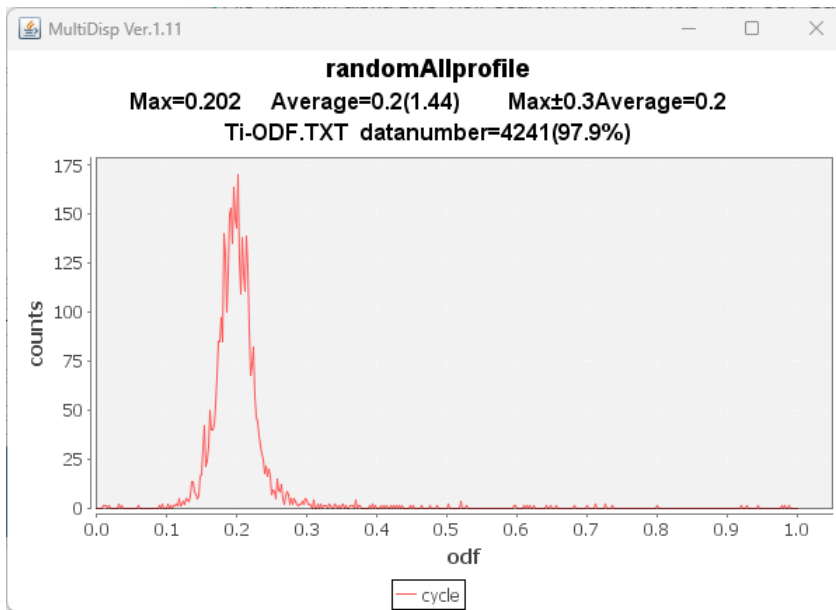


#### 14.1 randomの定量

1. 0以下の密度を密度毎に500のBoxに振り分ける



Boxはバラツキにより選択



もしrandomが含まれていれば、random方位の数が最大を示す。  
上記では、Max=0.202 すなわち20.2%含まれます。

W11 (C) > LaboTex2 > USER > Ti.LAB > D6-Hexagonal.LAB > Demo.LAB > Ti.LAB > Job02

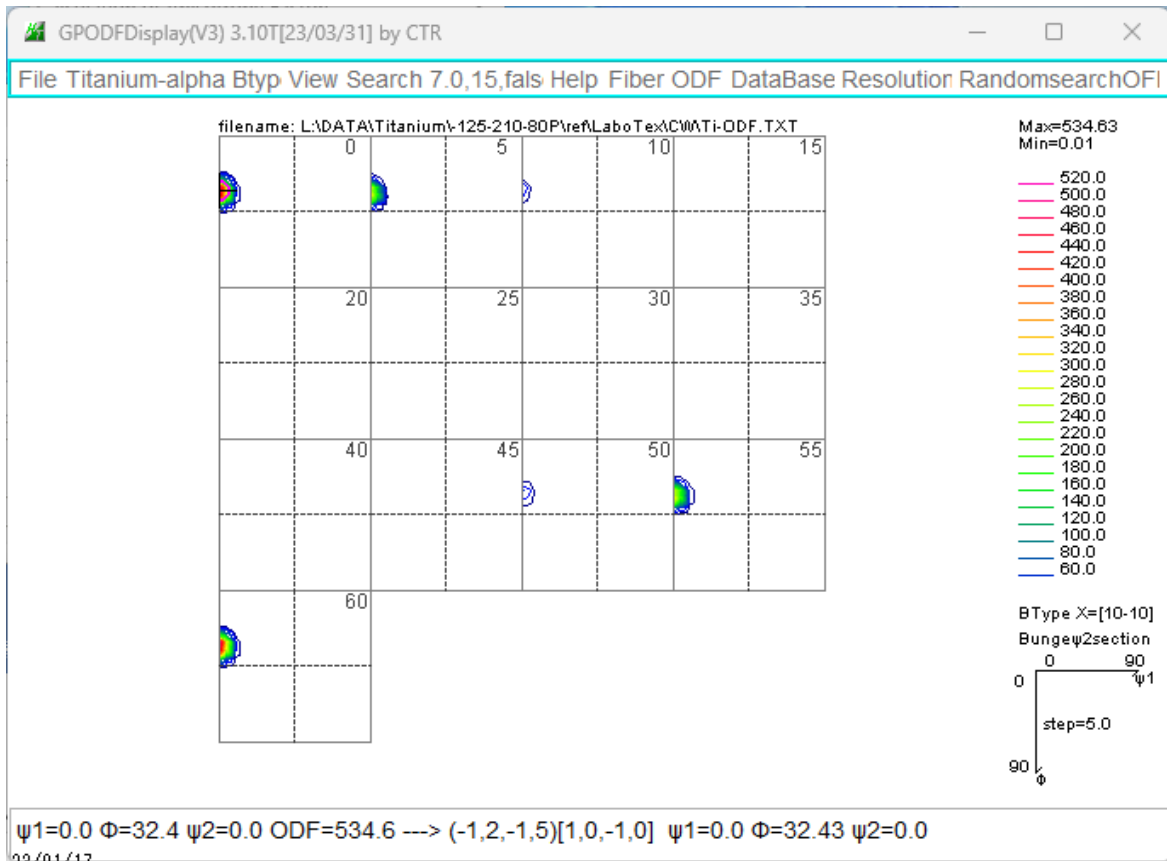
名前	更新日時	種類	サイズ
Ti.APF	2023/01/17 11:34	APF ファイル	6 KB
Ti.ODF	2023/01/17 11:27	ODF ファイル	18 KB
Ti.POD	2023/01/17 11:28	POD ファイル	1 KB

LaboTex - Texture - Quantitative Analysis Report  
 User: Ti  
 Project: Demo  
 Sample: Ti  
 Job: 2  
 Date: 2023/01/17  
 Time: 11:28:57

Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No. 1	-	-	-	-
79.91	Distribution :Gauss	9.9	9.9	10.8
20.09	Background Volume Fraction			{ -1 2 5 } < 2 1 0 >

## 14.2 方位解析

ODF図上にマウスカーソルを動かすとリアルタイムで計算された方位を示しクリックで固定する。

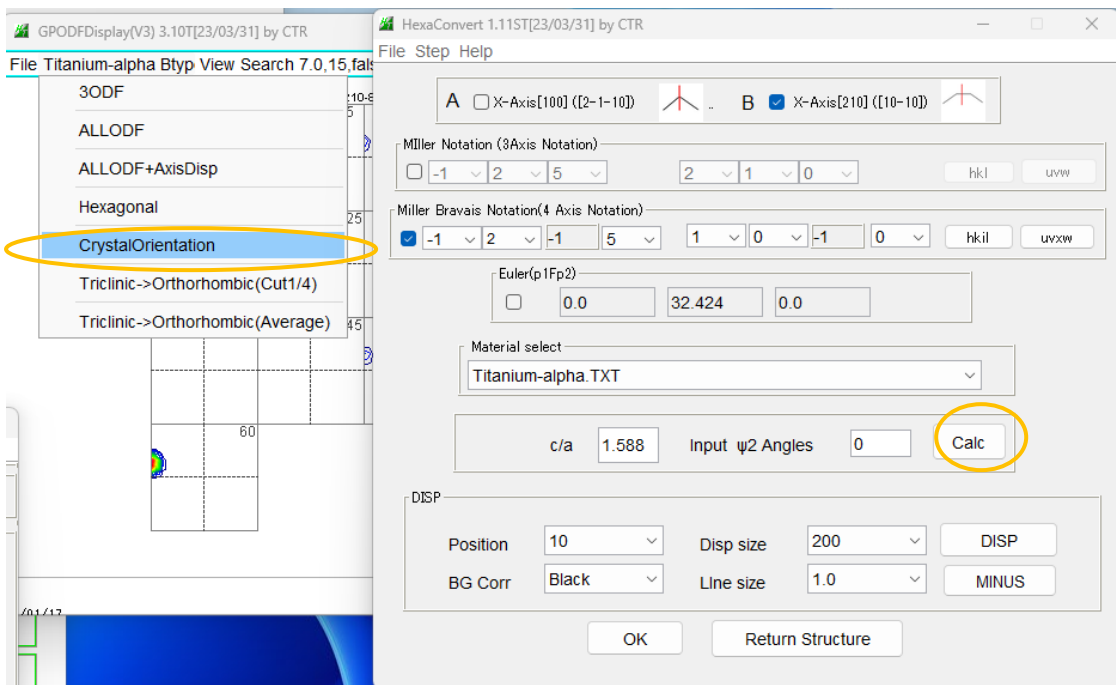


ψ1=3.0 Φ=32.4 ψ2=0.0 ODF=283.1 euler 角度 (3.0,32.4,0.0) の密度が 534.6

Euler 角度から計算した方位が  $(-1,2,-1,5)[1,0,-1,0]$

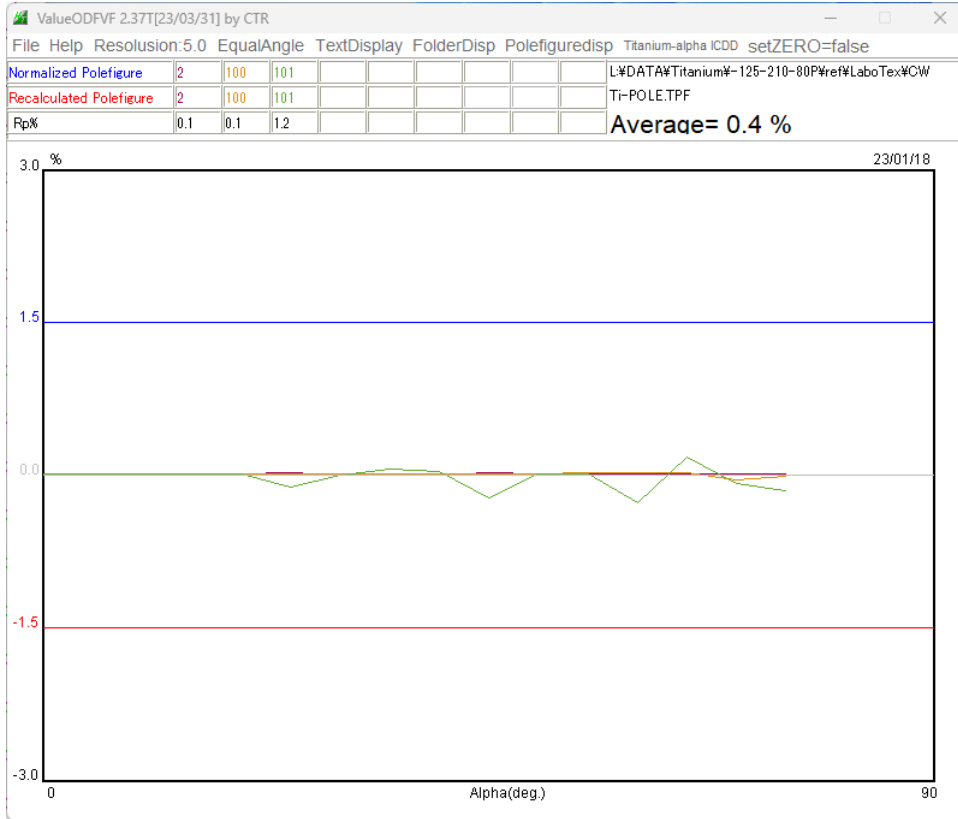
整数化された方位から計算した euler 角度が ψ1=0.0 Φ=32.43 ψ2=0.0

4 指数 ← → 3 指数の確認は



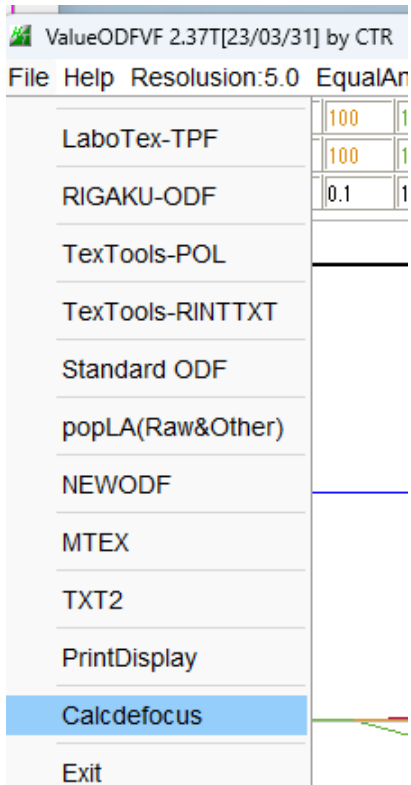
## 1 5. 極点図解析

### 1 5. 1 入力極点図と再計算極点図から入力極点図の E r r o r 評価



不完全極点図として評価される

defocus 関係の場合、defocus の再評価が可能





## 15.2 VolumeFractionのError評価

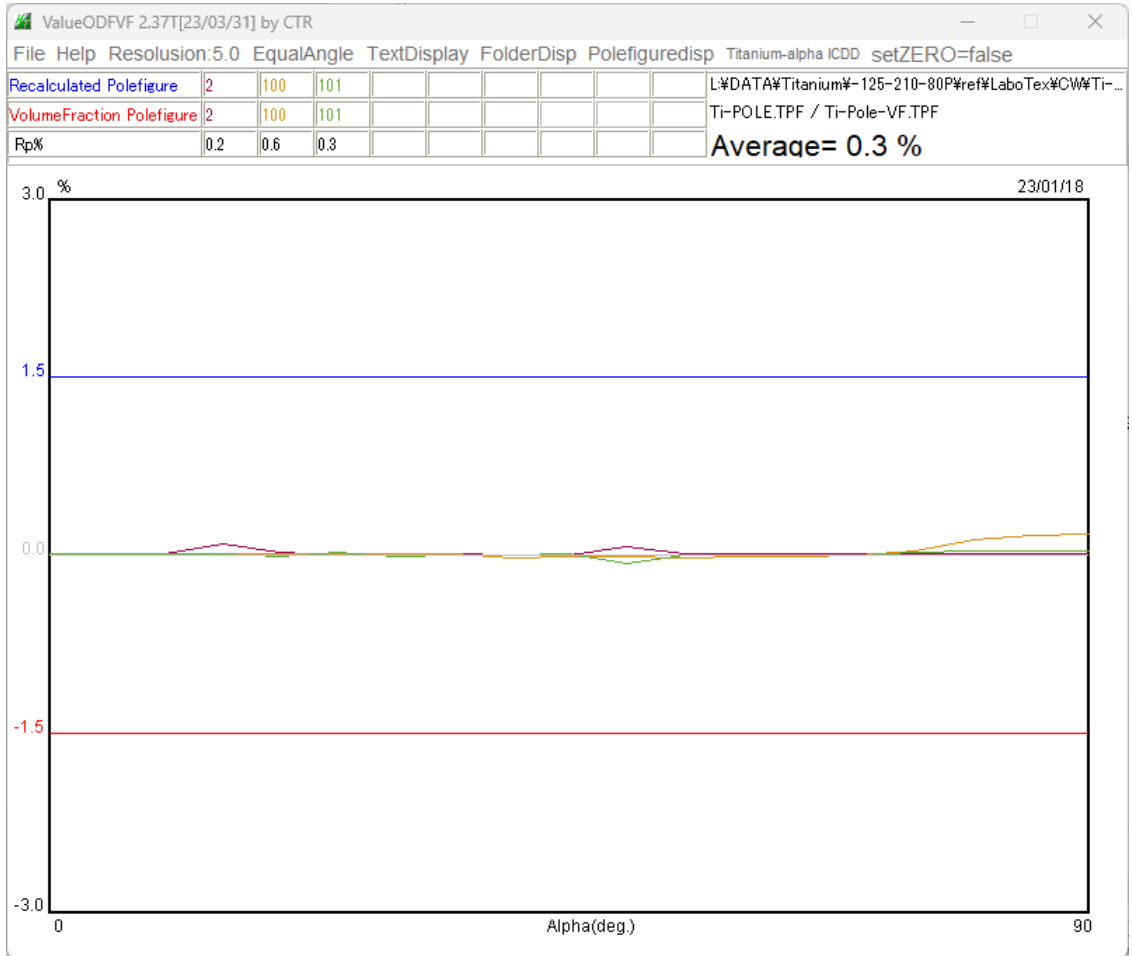
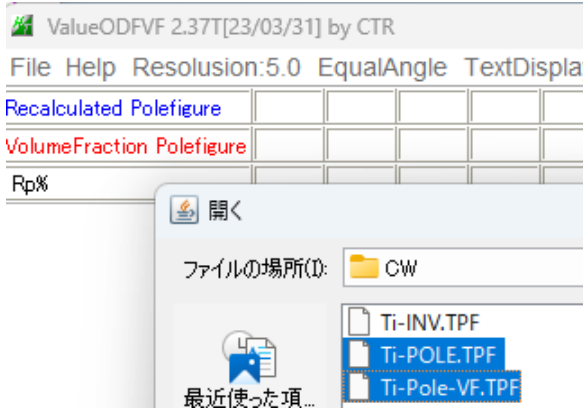
VF%計算では未定量評価が重要

GPODFDisplayでrandomが定量されている

100 - (求められた総定量値 + random値) が未定量値

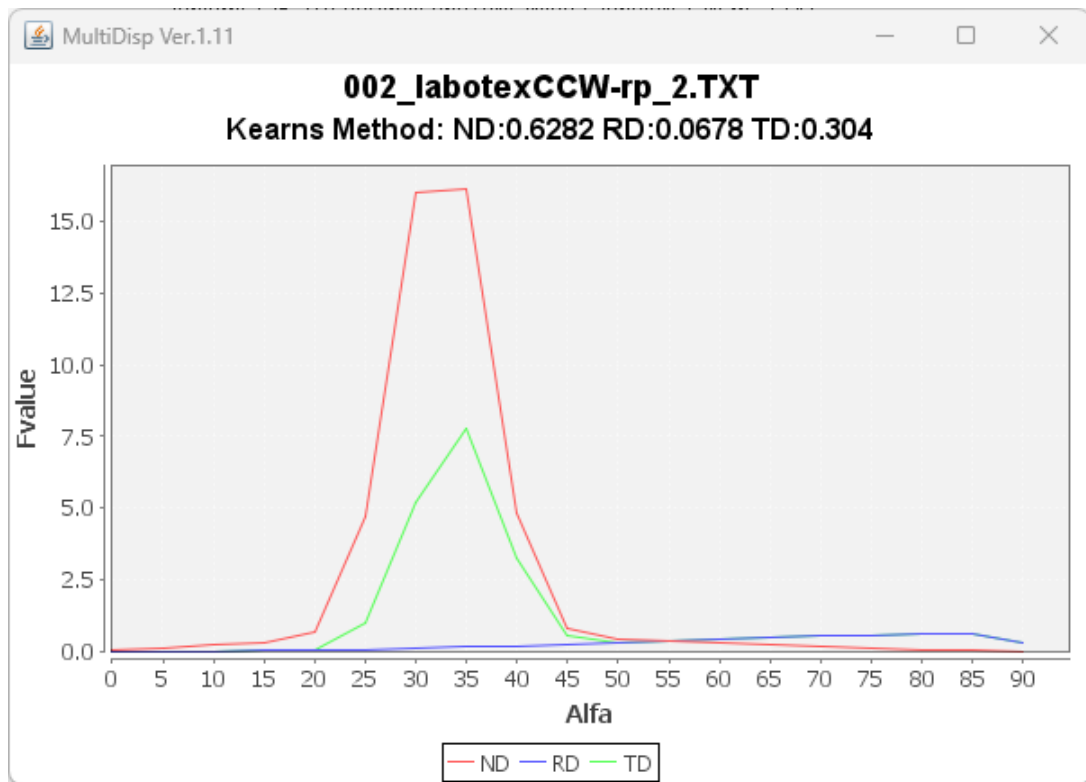
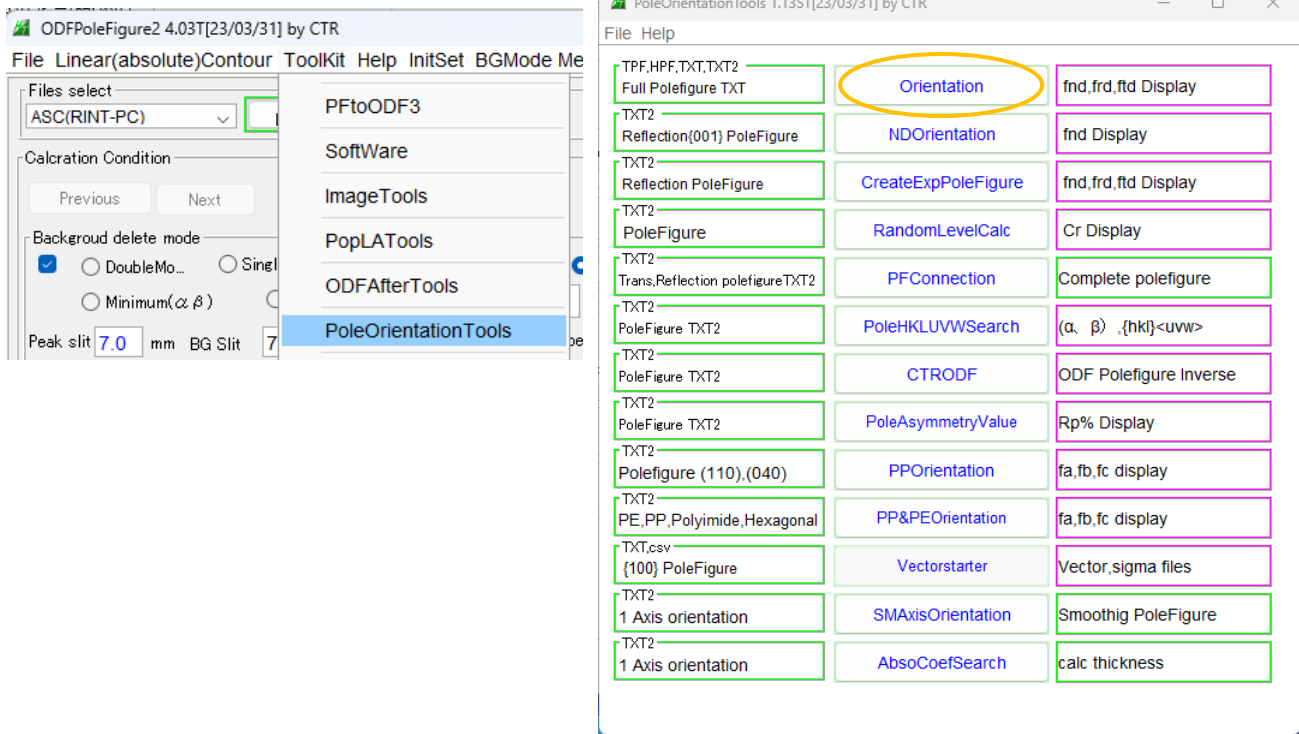
極点処理で正確なバックグラウンド除去が重要

Exportした極点図 (再計算極点図、VF%から計算した極点図を選択)



完全極点図として比較される

1 5 . 3 配向関数評価  
 { 0 0 1 } 極点図による評価

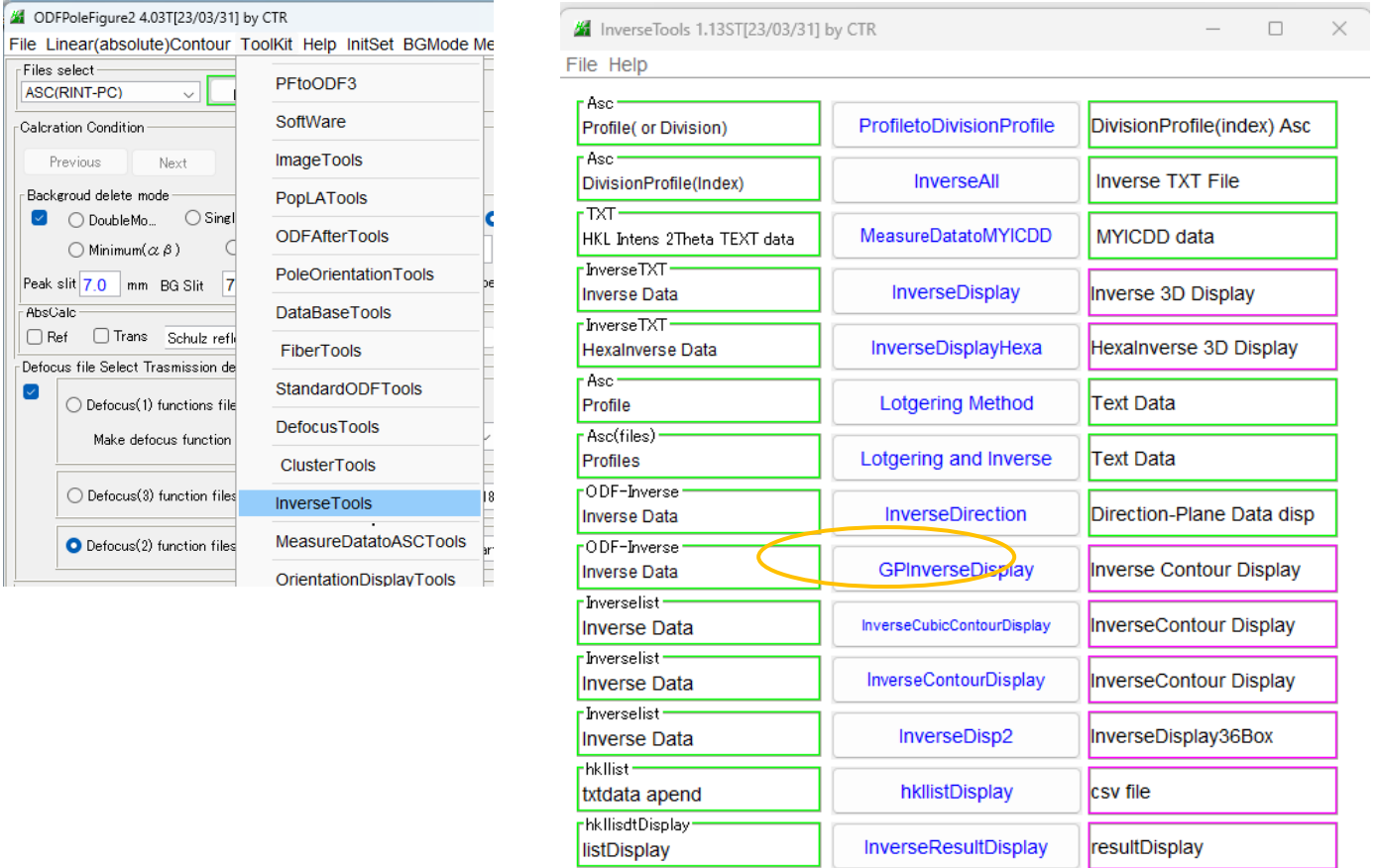


L a b o T e x 計算値と一致

Keams Factors (Fraction in Physical Property)		
LD	TD	ND
0.0679	0.3040	0.6281
fL	fT	fN

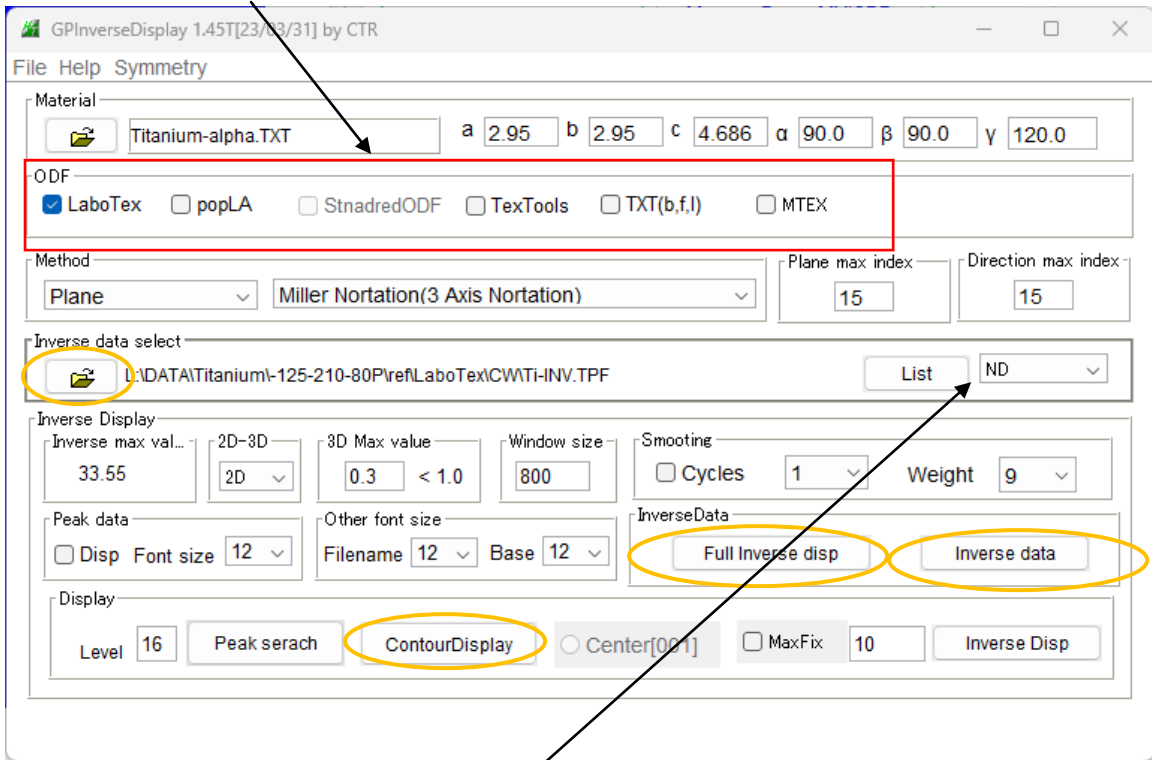
16. 逆極点図

ODFPoleFigure -> InverseTools



LaboTexを指定し、Exportした逆極点図を選択

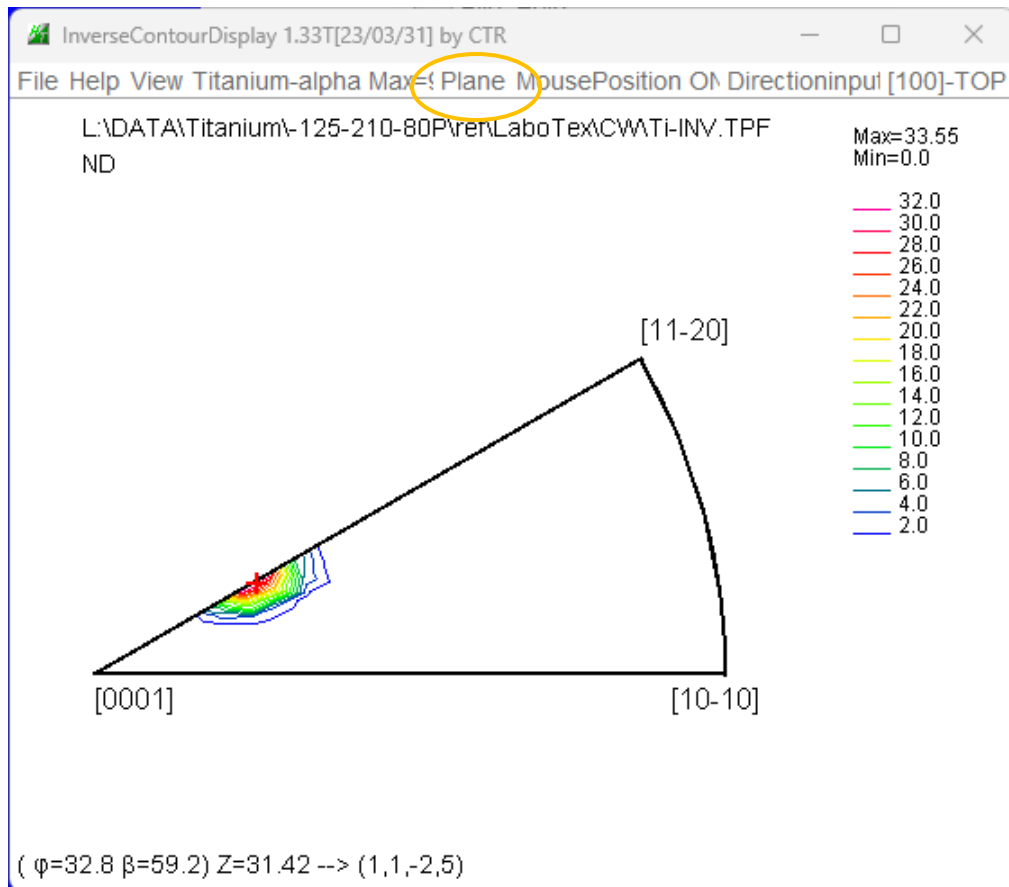
ODF解析の種類 (StandardODFではHexagonalは扱えない)



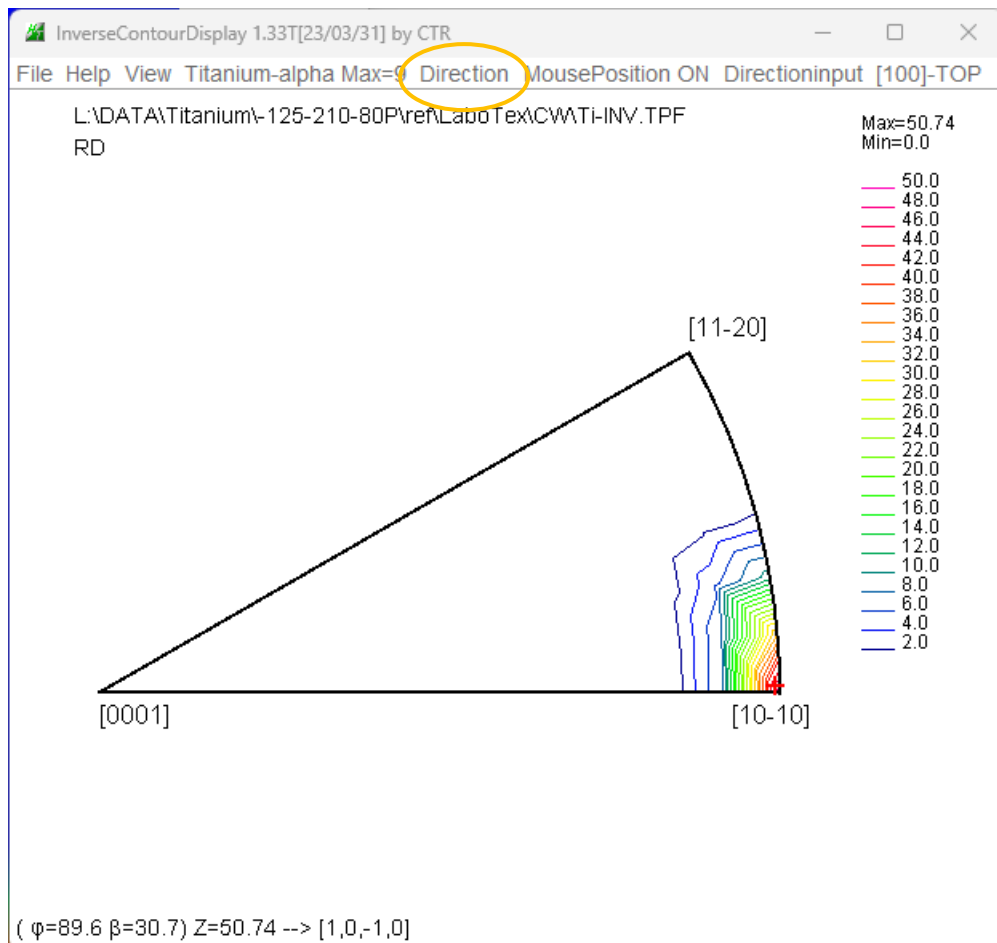
LaboTexの場合 (RD,TD,ND) を指定

FullInverseDisp,InverseData,ContourDisp の順に指定

画面上のマウス移動、クリックで方位を表示 NDの場合Planeを指定

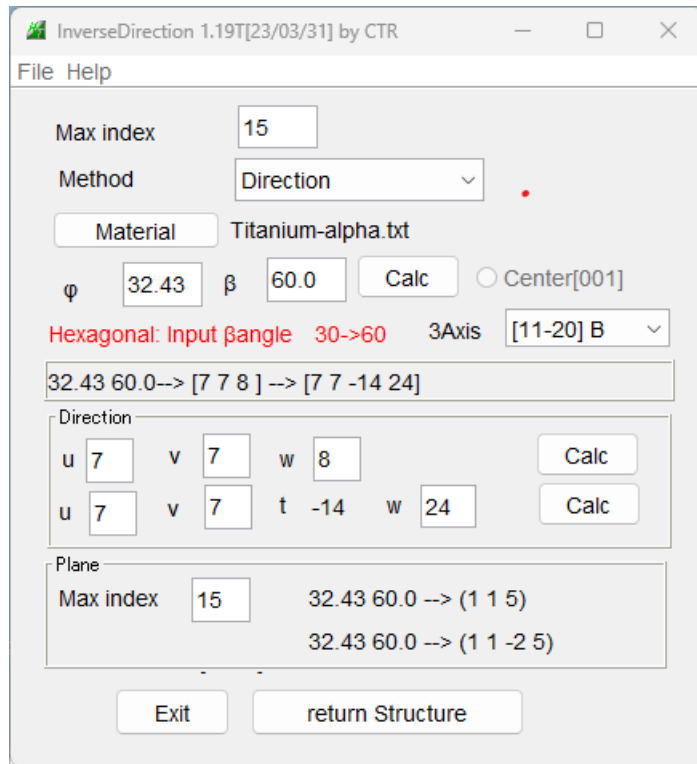


逆極点は通常DirectionであるDをDirectionで示すと



RD方向はDirectionで表示

NDをDirectionで表示すると



Direction 表示

Plane 表示

