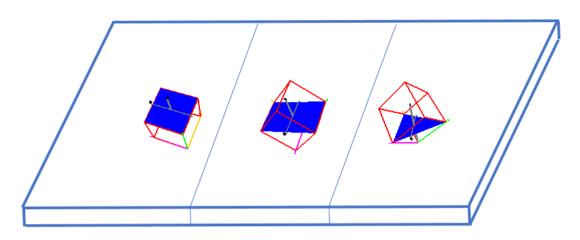
逆極点図、極点図による方位解析

2025年02月11日 HelperTex Office

- 1. 概要
- 2. θ/θ S c a n による逆極点解析
 - 2. 1 連続プロファイルをピーク毎の分割プロファイルに変換しrandom比率を計算
- 3. θ/θ S c a n によるロットゲーリング解析
- 4. 背面反射ラウエによる結晶方位解析
- 5. 単独極点図による方位解析
 - 5. 1 極点図の回転
 - 5.2 BCC単結晶のSchmid因子計算
- 6. 多結晶試料の方位解析
 - 6. 1 極点図から ODF 解析
 - 6. 2 Rp%の計算、VF%の計算
 - 6. 3 Schmid因子計算
- 7. 各種方位によるステレオ投影図
 - 7. 1 リガク [X線回折ハンドブック] SiO2のステレオ投影図を描画
 - 7. 2 CubicのCopper (112) [-1-11] と (112) [11-1] の違い

1. 概要

圧延版などの方位解析では逆極点図、極点図、ODF図が計算され比較されている。 単結晶では、1方位の集合であるが、圧延版は各種方位結晶粒の集合体でその量を比較する。



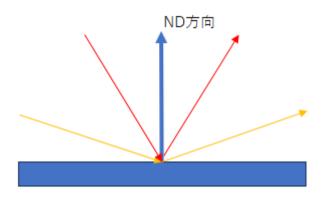
X線回折では、randomサンプルとの比較が行われる。

一般的な θ/θ S c a n では、圧延版のND方向の測定が行われ、広範囲の測定データと r a n d o m 試料との 比較で逆極点解析、限られた反射を利用したロットゲーリング手法が用いられている。

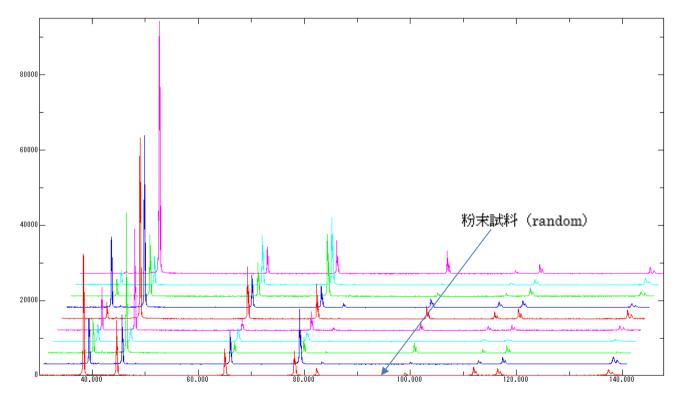
極点測定では、X線ビームに対し、 2θ 角度を固定し、sampleを煽りと回転であらゆる方向の測定を行い、極点図が作成される。多結晶の場合、複数の極点図を測定し、ODF解析による方位解析が行われる。単結晶の場合、背面写真や1面極点図から方位解析が行われる。以下に、

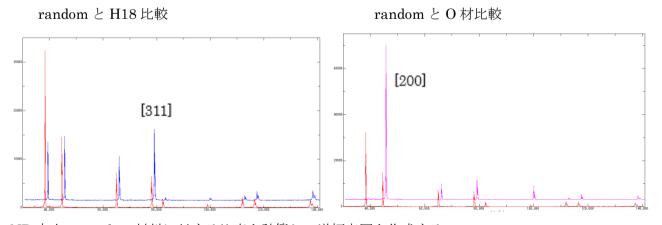
θ/θ S c a n による逆極点解析 θ/θ S c a n によるロットゲーリング解析 背面反射ラウエによる結晶方位解析 単独極点図による方位解析 多結晶試料の方位解析 各種方位によるステレオ投影図 を紹介します。

2. θ/θ S c a n による逆極点解析



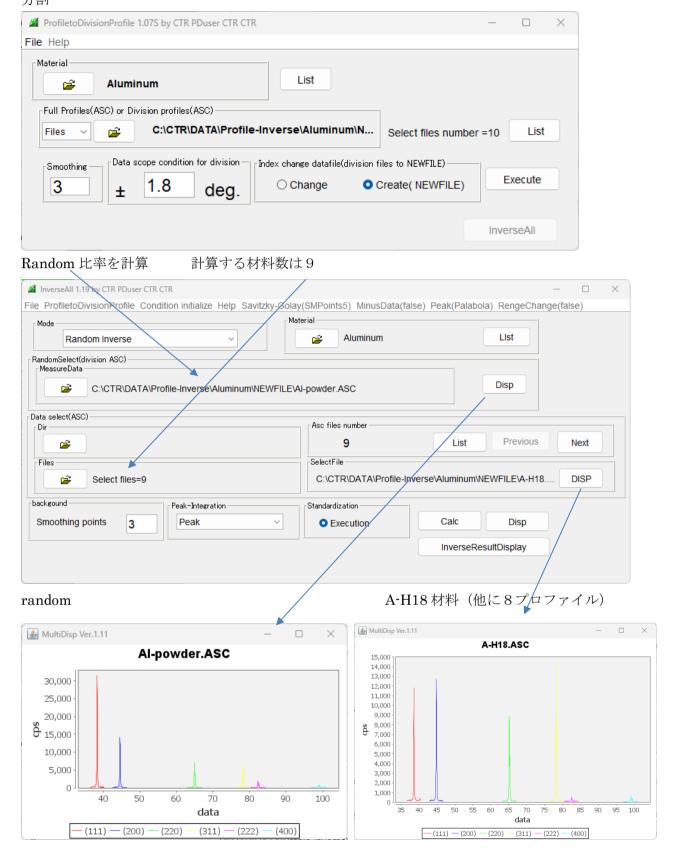
材料表面の対称反射測定によるプロファイルから解析が行われる 以下はアルミニウムの粉末プロファイルと各種圧延板の θ/θ S c a n プロファイル

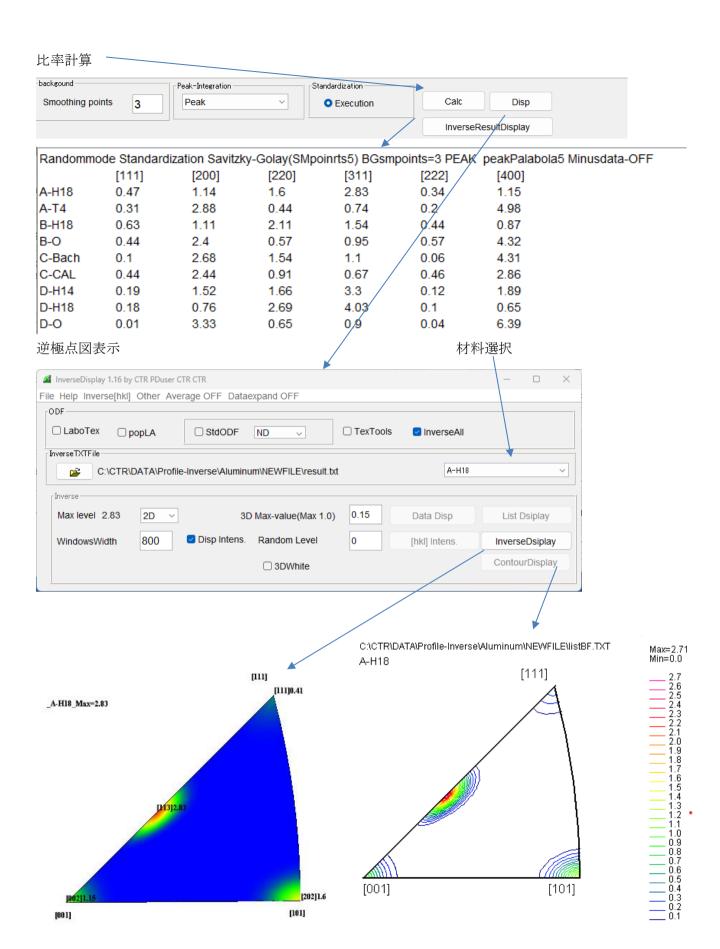




ND 方向の random 材料に対する比率を計算し、逆極点図を作成する

2. 1 連続プロファイルをピーク毎の分割プロファイルに変換しr a n d o m比率を計算 分割





- 3. θ/θ S c a n によるロットゲーリング解析
- 1軸配向評価方法として使われている方法である。
 - C軸配向の場合

f = (p-p 0) / (1-p 0) $p 0 = \Sigma I o (0 0 1) / \Sigma I 0 (h k 1)$

 $p = \Sigma I (001) / \Sigma I (h k 1)$

p 0 は無配向サンプルのX線回折強度(I0)を用いる

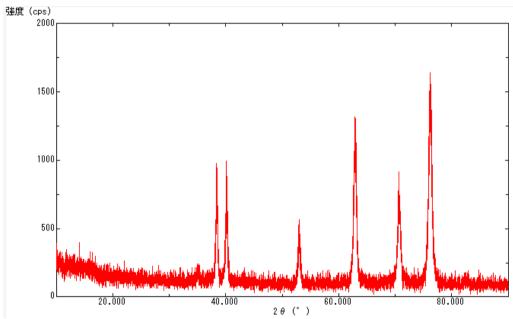
p は配向サンプルのX線回折強度(I)を用いる

f をロットゲーリングファクタと呼ばれている。

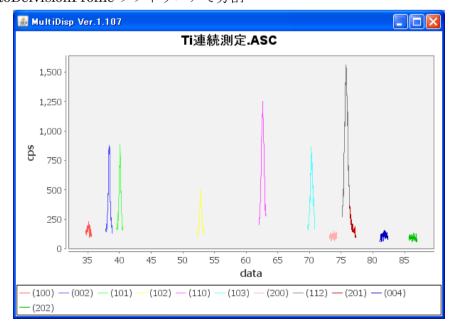
最大値は1.0であり、randomより弱いとマイナスの値になる。

試しに1軸配向ではないTi薄膜に応用してみます。

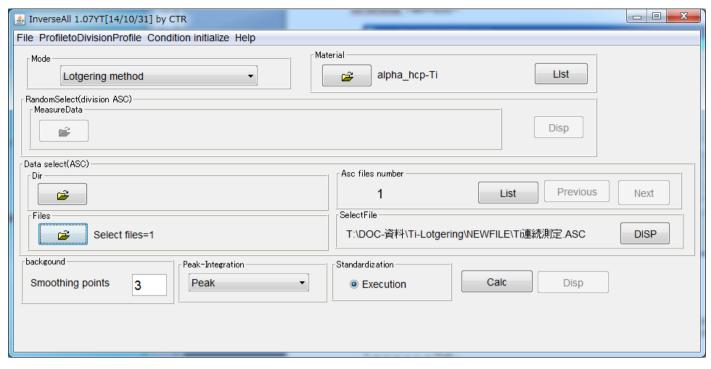
入力データ



ProfiletoDeivisionProfile ソフトウエアで分割



InverseAll で読み込む



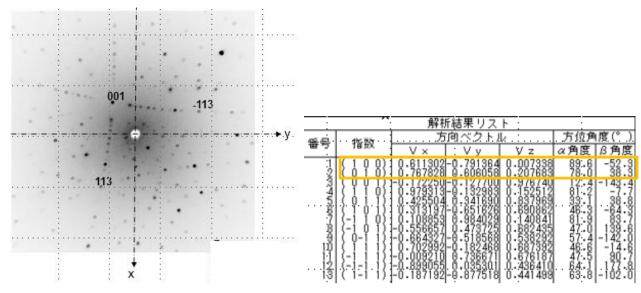
Calcで

Lotgering method Standardization BGsmpoints=3 PEAK									
	(100)	(002)	(101)	(102)	(110)	(103)	(200)	(112)	(201)
Ti連続測定	-0.1	0.027	-0.532	0.015	0.15	0.076	0.0020	0.195	-0.037
Inverseでは									
ICDDmode S	Standardizati	ion BGsmpoin	ts=3 PEAK						
	(100)	(002)	(101)	(102)	(110)	(103)	(200)	(112)	(201)
Ti連続測定	0.173	1.284	0.326	1.281	3.08	2.104	1.081	3.699	0.176

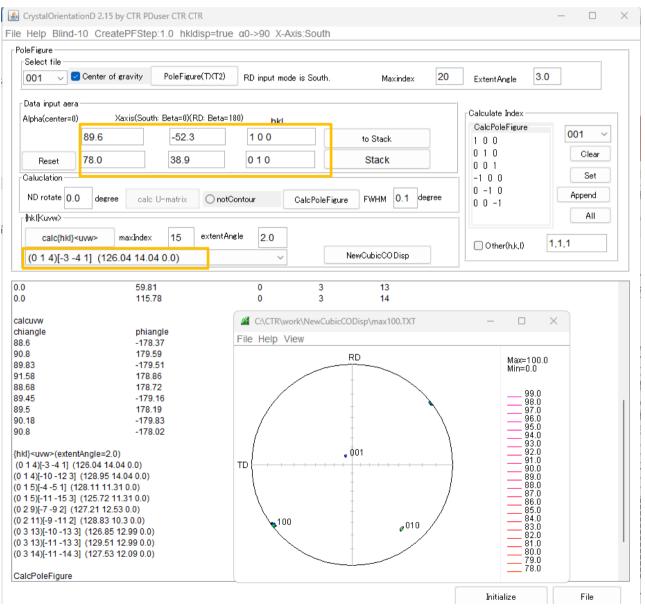
逆極点でrandomレベル1.0より低いとロットゲーリングファクタはマイナスになります。

詳細はInverseAll説明書を参照

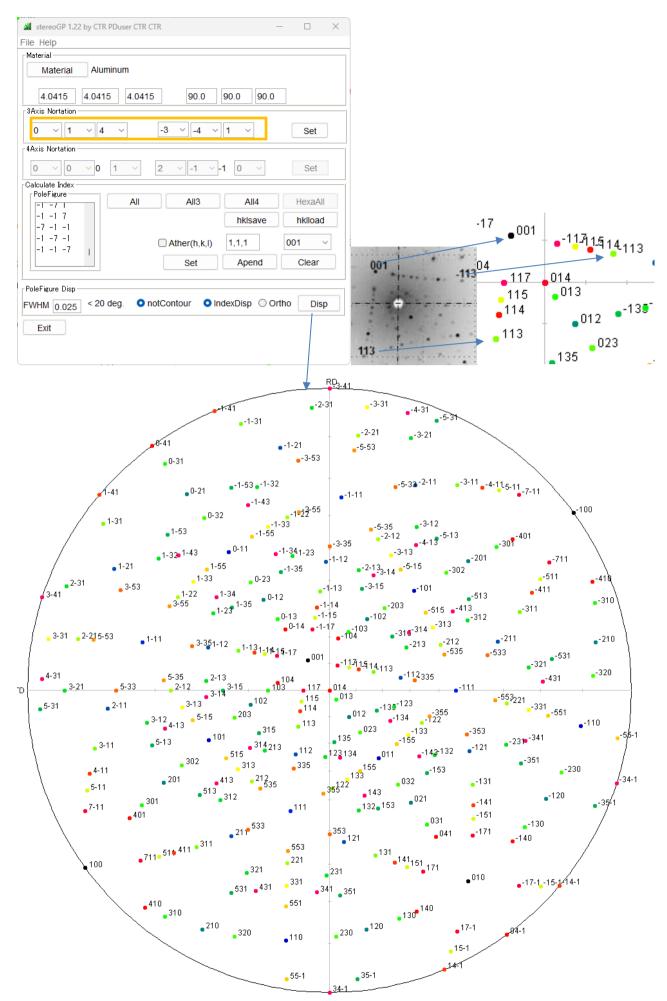
4. 背面反射ラウエによる結晶方位解析



指数付け角度を用いて方位解析を行う。

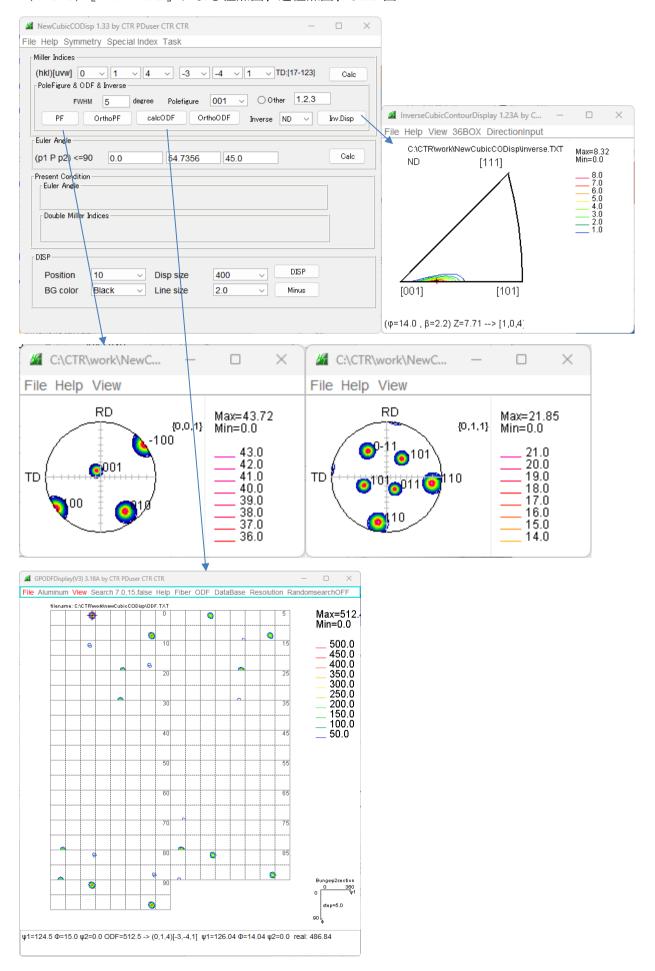


(014)[-3-41] が計算される。stereoPにて確認 詳細はCrystalOrientationD説明書を参照



詳細はstereoP説明書を参照

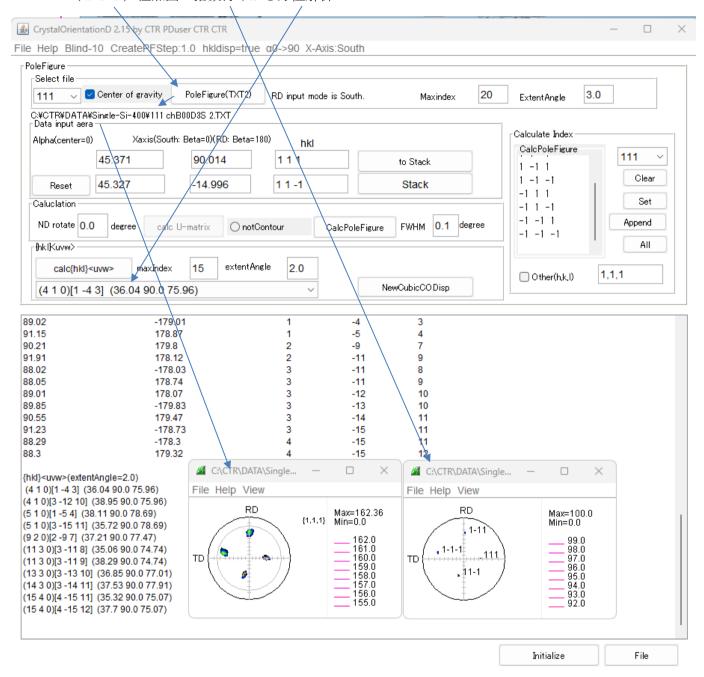
(014) [-3-41] による極点図、逆極点図、ODF 図



詳細はNewCubicCODisp参照

5. 単独極点図による方位解析

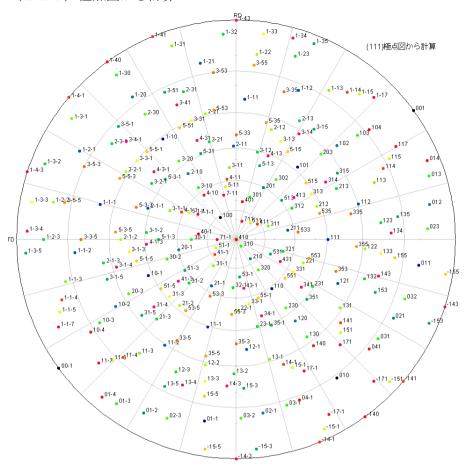
(111) 極点図の指数付けから方位解析



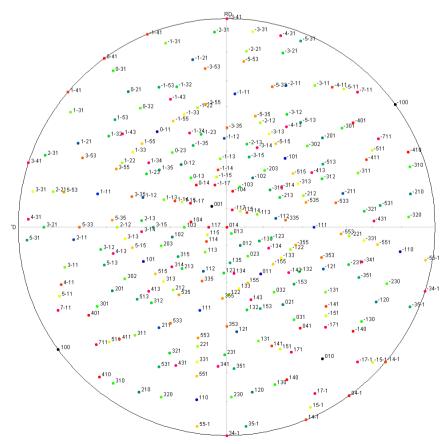
(111) 極点図から方位(410)[1-43] が計算されています。

詳細はCrsytalOrientationD説明書を参照

(111)極点図から計算



ラウエカメラデータから計算

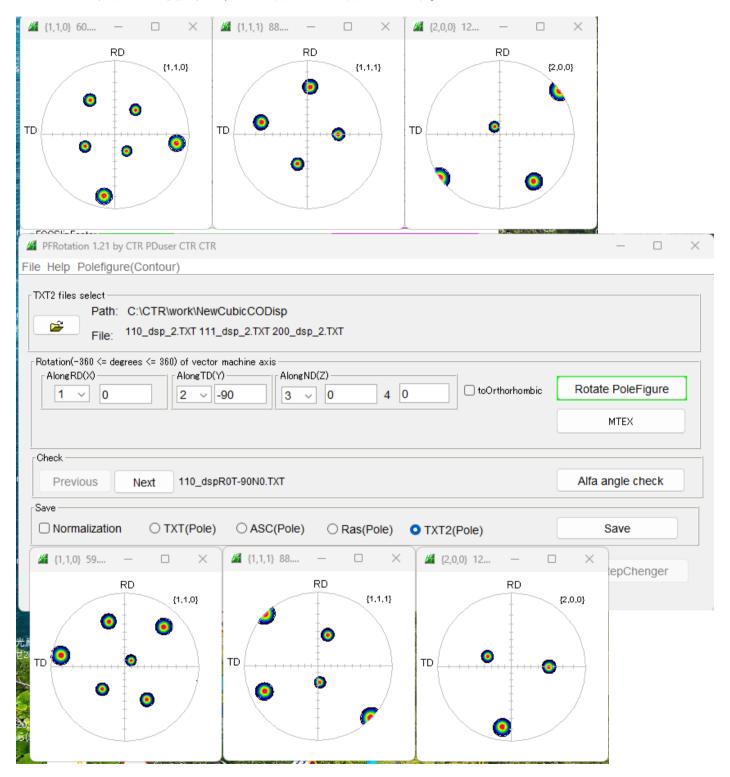


同一結果が得られます。

5.1 極点図の回転

RD 方向から測定した極点図から ND 方向の極点図を計算することがあります。 今回は ND 方向の極点図から RD 方向の極点図を計算する。

TD 軸を-90 度回転で、RD 方向が ND 方向になります。



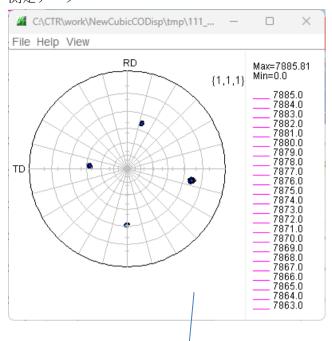
極点図の回転では完全極点図が必要になります。

反射法のみの極点図の場合、ODF解析を行い、軸回転で回転極点図が得られます。 LaboTexでサポートされています。

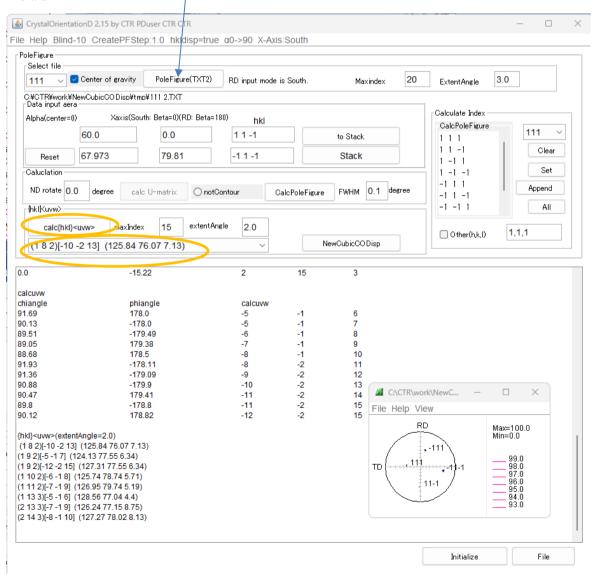
詳細はPFRotation説明書を参照

5. 2 BCC単結晶のSchmid因子計算

測定データ

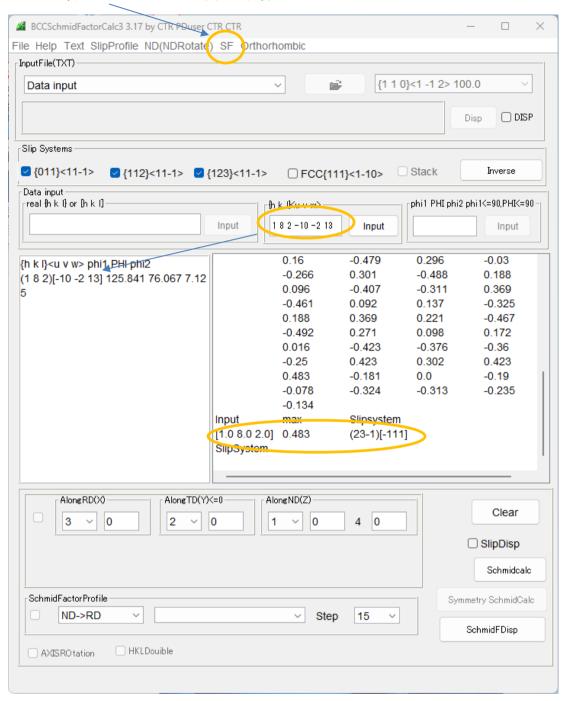


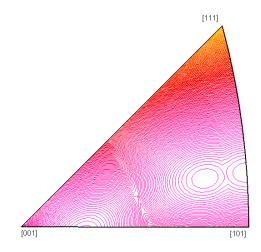
結晶方位の決定



詳細はCrsytalOrientationD説明書を参照

BCCの引っ張りSchmid因子の計算





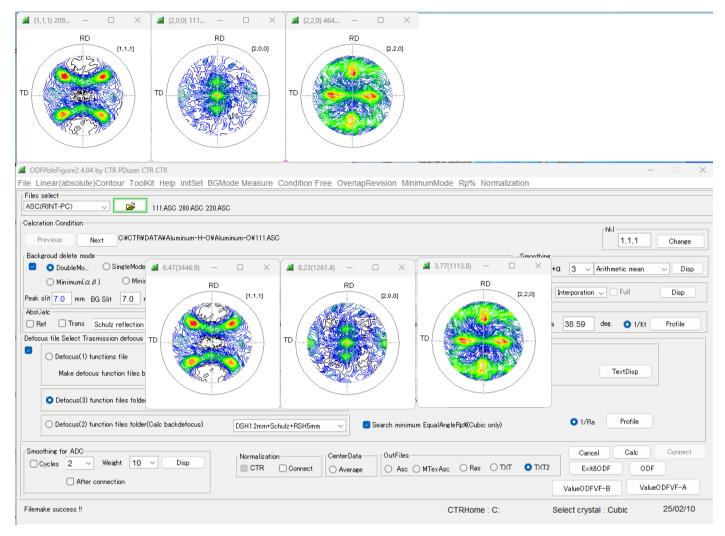
詳細はBCCSchmidfactorCalc説明書を参照

計算の詳細 Input

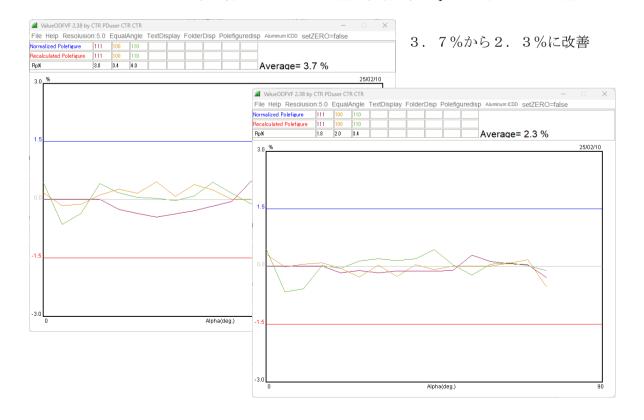
Input	max	Slipsystem			
[1.0 8.0 2.0]	0.483	(23-1)[-111]			
SlipSystem					
slip0	(-211)[111]	0.301	slip21	(-231)[-1-11]	-0.376
slip1	(1-21)[111]	-0.488	slip22	(123)[-1-11]	-0.36
slip2	(11-2)[111]	0.188	slip23	(213)[-1-11]	-0.25
slip3	(2-11)[-1-11]	0.096	slip24	(321)[-111]	0.423
slip4	(-121)[-1-11]	-0.407	slip25	(312)[-111]	0.302
slip5	(112)[-1-11]	-0.311	slip26	(13-2)[-111]	0.423
slip6	(211)[-111]	0.369	slip27	(23-1)[-111]	0.483
slip7	(-1-21)[-111]	-0.461	slip28	(1-23)[-111]	-0.181
slip8	(-11-2)[-111]	0.092	slip29	(2-13)[-111]	0.0
slip9	(-2-11)[1-11]	0.137	slip30	(32-1)[1-11]	-0.19
slip10	(121)[1-11]	-0.325	slip31	(31-2)[1-11]	-0.078
slip11	(1-1-2)[1-11]	0.188	slip32	(132)[1-11]	-0.324
slip12	(-321)[111]	0.369	slip33	(231)[1-11]	-0.313
slip13	(-312)[111]	0.221	slip34	(-123)[1-11]	-0.235
slip14	(1-32)[111]	-0.467	slip35	(-213)[1-11]	-0.134
slip15	(2-31)[111]	-0.492			
slip16	(12-3)[111]	0.271			
slip17	(21-3)[111]	0.098			
slip18	(3-21)[-1-11]	0.172			
slip19	(3-12)[-1-11]	0.016			
slip20	(-132)[-1-11]	-0.423			

6. 多結晶試料の方位解析

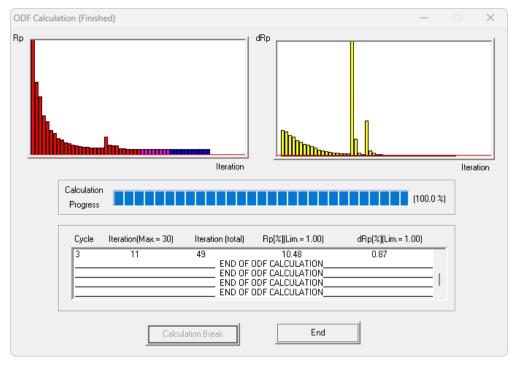
多結晶から方位解析を行う場合、複数の極点図測定データが必要になります。



バックグランド除去、計算 d e f o c u s 補正、最小化R p %で測定データを補正

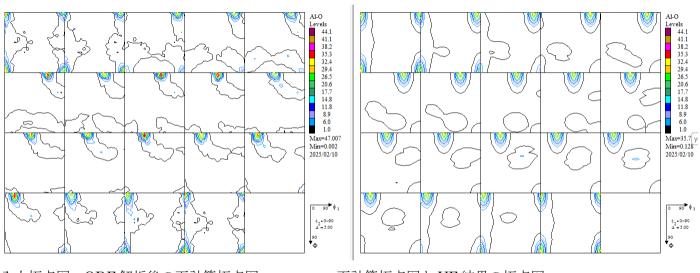


6. 1 極点図から ODF 解析



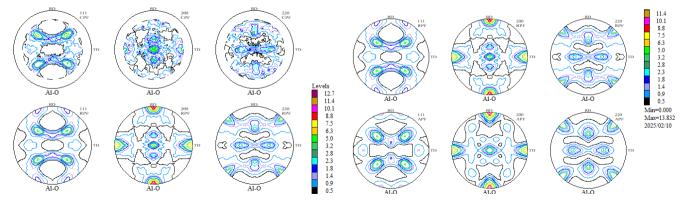
入力極点図から計算したODF図

VolumeFraction 結果から計算された ODF 図



入力極点図、ODF 解析後の再計算極点図

再計算極点図と VF 結果の極点図



6.2 Rp%の計算

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

where:

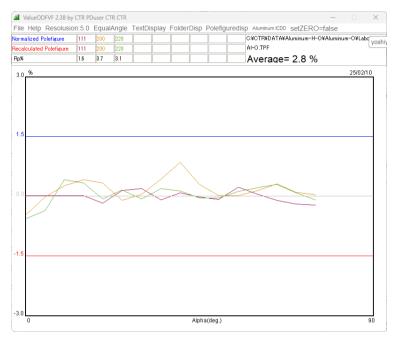
 $RP_{\{hkl\}}$ - relative error for $\{hkl\}$ pole figure,

{PF_{exp.}}_i - intensity of experimental (corrected and normalized) pole figure in point i,

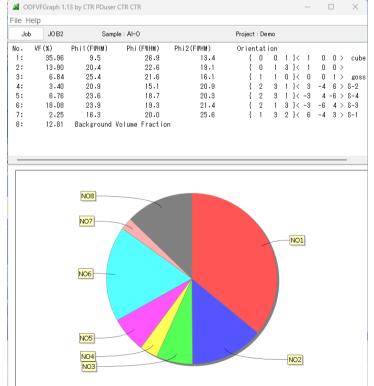
point i, $\left\{ PF_{calc.}\right\} _{i}\text{ - intensity of calculated pole figure in point i,}$

N - number of measured points on pole figure.

入力極点図と ODF 解析後の再計算極点図から



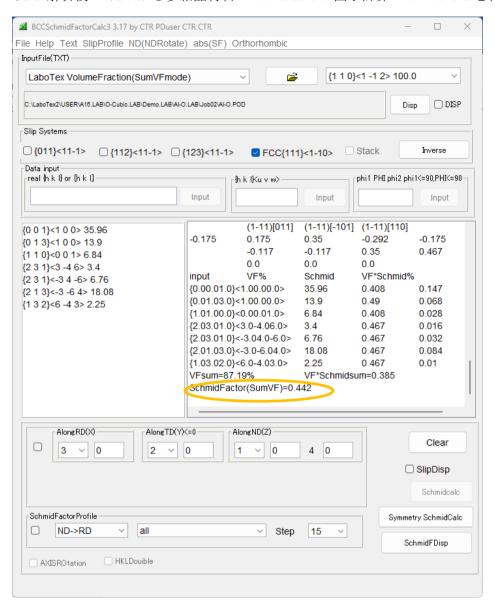
結晶方位の定量 VolumeFraction (VF%) を計算



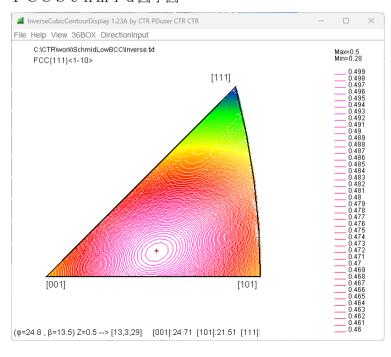
No. VF(%) Orientation	
1: 35.96 { 0 0 1 }< 1 0 0 >	cube
2: 13.90 { 0 1 3 }< 1 0 0 >	
3: 6.84 { 1 1 0 }< 0 0 1 >	goss
4: 3.40 { 2 3 1 }< 3 -4 6 >	8-2
5: 6.76 { 2 3 1 }< -3 4 -6 >	S-4
6: 18.08 { 2 1 3 }< -3 -6 4 >	8-3
8: 12.81 { 1 3 2 }< 6 -4 3 >	8-1

6. 3 Schmid 因子計算

ODF 解析後の VF%から多結晶材料の Schmid 因子計算 0.442を得る。



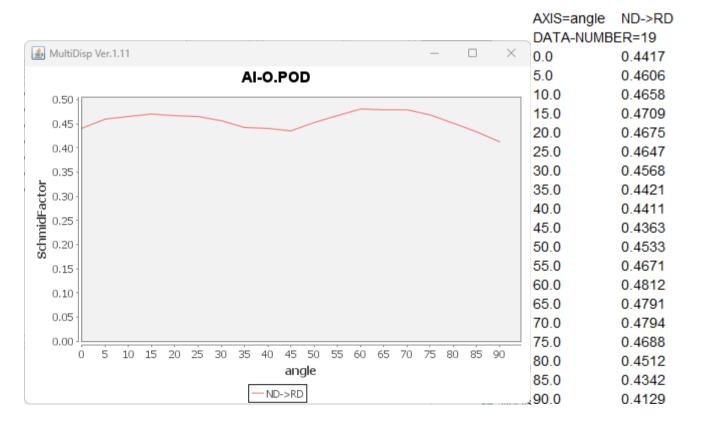
FCCSchmid因子図



計算の詳細(Schmid 因子は Abs()を選択)

11 21, 42 11	HANDELLING DE LA LIDEO CENTO								
	input V	′F%	Schmid	VF*Schmid%					
	{0.00.01.0}<1.0	<0.00.0	35.96	0.408	0.147				
	{0.01.03.0}<1.0	<0.00.0	13.9	0.49	0.068				
	{1.01.00.0}<0.0	0.01.0>	6.84	0.408	0.028				
	{2.03.01.0}<3.0	-4.06.0>	3.4	0.467	0.016				
	{2.03.01.0}<-3.	04.0-6.0>	6.76	0.467	0.032				
	{2.01.03.0}<-3.	0-6.04.0>	18.08	0.467	0.084				
	{1.03.02.0}<6.0	-4.03.0>	2.25	0.467	0.01				
	VFsum=87.19%	6	VF*Schmidsu	ım=0.385					
slip0	(111)[0-11]	0.408	0.327	-0.408	-0.35	-0.35	0.35	-0.175	
slip1	(111)[-101]	0.408	0.49	-0.408	-0.175	-0.175	0.175	0.175	
slip2	(111)[-110]	0.0	0.163	0.0	0.175	0.175	-0.175	0.35	
slip3	(-1-11)[011]	0.408	0.327	-0.408	-0.467	-0.467	0.0	-0.292	
slip4	(-1-11)[101]	0.408	0.245	-0.408	-0.35	-0.35	0.0	-0.175	
slip5	(-1-11)[-110]	0.0	0.082	0.0	-0.117	-0.117	0.0	-0.117	
slip6	(-111)[0-11]	0.408	0.327	0.0	-0.117	-0.117	0.117	-0.117	
slip7	(-111)[101]	0.408	0.49	0.0	0.175	0.175	0.292	0.35	
slip8	(-111)[110]		0.163	0.0	0.292	0.292	0.175	0.467	
slip9	(1-11)[011]		0.327	0.0	0.0	0.0	0.467	0.0	
slip10	(1-11)[-101]		0.245	0.0	0.0	0.0	0.117	0.0	
slip11	(1-11)[110]	0.0	0.082	0.0	0.0	0.0	0.35	0.0	

ND->RD プロファイル



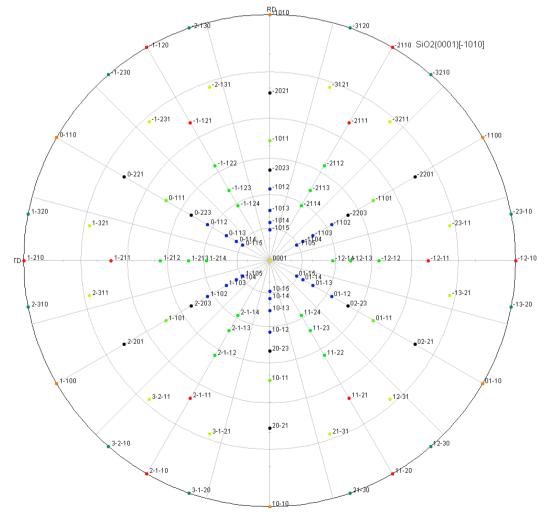
7. 各種方位によるステレオ投影図

CTRソフトウエアのステレオ投影図描画は、Cubic, Tetoragonal, Orthorhombic, Hexagonalに 対応しています。

(hkl)「uvw」を指定でステレオ投影図を描画します。

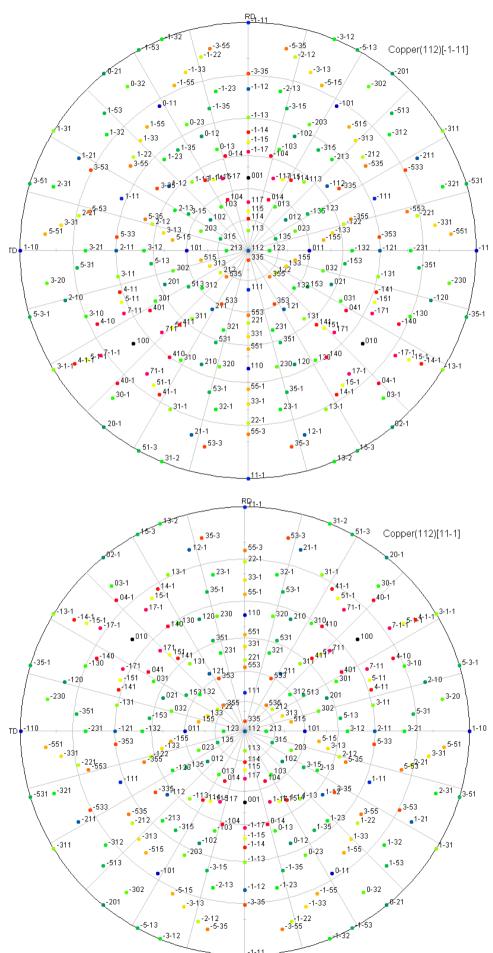
リガク「X線回折ハンドブック」SiO2のステレオ投影図を描画





複数の極点図を重ね合わせで実現しています。

```
42.14
                                           60.0
                                                      11-22↓
                                                                 24.35
                                                                           240.0
                                                                                    -1-121↓
          30.0
                     20-21↓
                                 42.14
                                           300.0
                                                      1-212↓
21.4
                     2-201↓
                                                                           60.0
                                                                                    11-20↓
                                                                 0.0
          330.0
                                                      2-1-12↓
                                 42.14
                                           0.0
                                                                           300.0
                                                                                     1-210↓
                                                                0.0
21.4
          150.0
                     -2201 \place*
                                                                                    2-1-101
                                                      -2112<sup>↓</sup>
                                 42.14
                                           180.0
                                                                 0.0
                                                                           0.0
21.4
                     02-21↓
          90.0
                                                                                    -2110↓
                                                      -12-12↓
                                                                           180.0
                                 42.14
                                           120.0
                                                                0.0
21.4
                     -2021 \place
          210.0
                                           240.0
                                                      -1-122 \downarrow 0.0
                                                                           120.0
                                                                                    -12-10<sup>↓</sup>
21.4
                                 42.14
                    0-221↓
20-23↓
          270.0
                                                                          240.0
                                                                                    -1-120<sup>↓</sup>
                                 53.62
                                           60.0
                                                      11-23↓
                                                                0.0
49.62
          30.0
                                                      1-213↓
2-1-13↓
                                53.62
                                           300.0
                     2-203↓
49.62
          330.0
                                 53.62
                                           0.0
49.62
          150.0
                     -2203<sup>↓</sup>
                                 53.62
                                           180.0
                                                      -2113↓
49.62
                     02-23↓
          90.0
                                 53.62
                                           120.0
                                                      -12-13↓
                     -2023<sup>↓</sup>
49.62
          210.0
                                 53.62
                                           240.0
                                                      -1-123↓
          270.0
                     0-223↓
49.62
                                 61.08
                                           60.0
                                                      11-24↓
57.46
          30.0
                     10-12↓
57.46
57.46
57.46
                                 61.08
                                                      1-214↓
                                           300.0
          330.0
                     1-102↓
                                61.08
                                           0.0
                                                      2-1-144
          150.0
                     -1102<sup>↓</sup>
                                61.08
                                           180.0
                                                      -2114<sup>↓</sup>
          90.0
                     01-12↓
                                61.08
                                           120.0
                                                      -12-14\black
57.46
          210.0
                     -1012↓
                                           240.0
57.46
          270.0
                     0-112↓
                                 61.08
                                                      -1-124<sup>\(\psi\)</sup>
66.96
                                 38.09
                                           30.0
                                                      10-11↓
                     10-13↓
          30.0
                                 38.09
                                                      1-101↓
                                           330.0
66.96
          330.0
                     1-1034
                     -1103↓
                                 38.09
                                           150.0
                                                      -1101↓
66.96
          150.0
                                           90.0
66.96
                                 38.09
                                                      01-11 \downarrow
          90.0
                     01-13↓
                                 38.09
                                           210.0
                                                      -10111
66.96
          210.0
                     -1013↓
                                 38.09
                                           270.0
                                                      0-1111 \downarrow
66.96
          270.0
                     0-1134
                                                      21-31↓
                     10-14↓
72.31
                                16.5
                                           49.11
          30.0
                                16.5
                                           70.89
                                                      12-31↓
72.31
          330.0
                     1-104↓
72.31
72.31
72.31
                                16.5
                                           310.89
                                                      2-311↓
          150.0
                     -1104\pl
                                16.5
                                           289.11
                     01-14↓
                                                      1-321↓
          90.0
          210.0
                     -1014<sup>↓</sup>
                                16.5
                                           349.11
                                                      3-2-11↓
                                           10.89
72.31
                                16.5
                                                      3-1-21↓
          270.0
                     0-114 \downarrow
75.68
                     10-15↓
                                16.5
                                           169.11
                                                      -3211↓
          30.0
                                16.5
                                           190.89
                                                      -3121↓
75.68
          330.0
                     1-105↓
                                16.5
75.68
          150.0
                    -1105<sup>↓</sup>
                                           130.89
                                                      -23-11↓
                                16.5
                                           109.11
                     01-15↓
                                                      -13-21↓
75.68
          90.0
75.68
          210.0
                     -1015↓
                                16.5
                                           229.11
                                                      -2-131↓
75.68
          270.0
                     0-115↓
                                16.5
                                           250.89
                                                      -1-231↓
                     21-30↓
0.0
          49.11
                                90.0
                                           180.0
                                                      00014
                     12-30↓
                                           30.0
0.0
          70.89
                                0.0
                                                      10-10↓
                    2-310↓
0.0
          310.89
                                0.0
                                           330.0
                                                      1-100 \downarrow
0.0
          289.11
                     1-320↓
                                           150.0
                                 0.0
                                                      -1100\pl
          349.11
                    3-2-10↓
0.0
                                0.0
                                           90.0
                                                      01-10↓
0.0
          10.89
                     3-1-20↓
                                0.0
                                           210.0
                                                      -1010<sup>↓</sup>
0.0
          169.11
                     -3210↓
                                0.0
                                           270.0
                                                      0-110 \downarrow
                                24.35
24.35
0.0
          190.89
                     -3120↓
                                           60.0
                                                      11-21↓
                    -23-10↓
0.0
          130.89
                                           300.0
                                                      1-211↓
0.0
          109.11
                    -13-20↓
                                 24.35
                                                      2-1-11↓
                                           0.0
                     -2-130<sup>↓</sup>
0.0
          229.11
                                           180.0
                                 24.35
                                                      -2111<del>↓</del>
0.0
          250.89
                     -1-230↓
                                 24.35
                                           120.0
                                                      -12-11↓
```



ND 軸 1 8 0 度の回転