

r a n d o m成分が含まれるマグネシウム合金のV o l u m e F r a c t i o n解析

2023年02月05日

HelperTex Office

1. 概要
2. 極点図
3. random成分を含むか？
4. 極点処理 (background削除、defocus補正)
 - 4.1 backgroundプロファイルを確認しプロファイルの修正
 - 4.1.1 バックグラウンドの修正
 - 4.2 defocus曲線
5. ODF向けデータ作成
6. random%の計算
 - 6.1 LaboTex
7. VolumeFractionの計算
8. まとめ

1. 概要

材料の異方性を調べる場合、極点図からODF解析が行われている。

しかし方位の定量としてVolume Fraction (VF%, 体積分率)まで解析される事は少ない。

VF%を求めるには、方位の組み合わせ解析が必要になり、更に解析打ち切りが難しい。

含まれる方位より少ない組み合わせが少ないと計算されるVF%が大きく計算されてしまう。

本資料ではマグネシウムを例に、random成分の有無、random成分のVF%の計算

マグネシウムのVF%の計算を説明します。

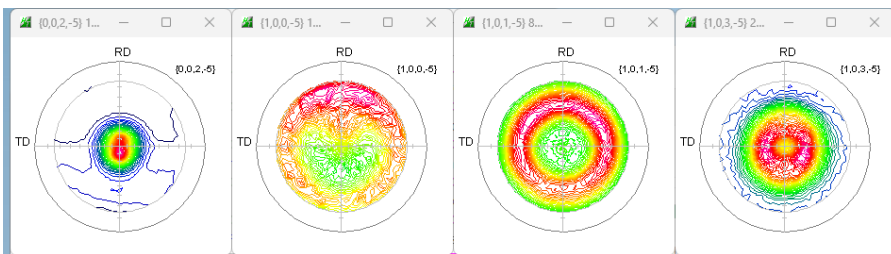
2. 極点図

backgroundを除いた方位の組み合わせ

$$A \text{ 方位} + B \text{ 方位} + C \text{ 方位} + D \text{ 方位} + \text{random} = 100\%$$

A方位	B方位	C方位	D方位
random			
background			

測定データ (backgroundを含む)

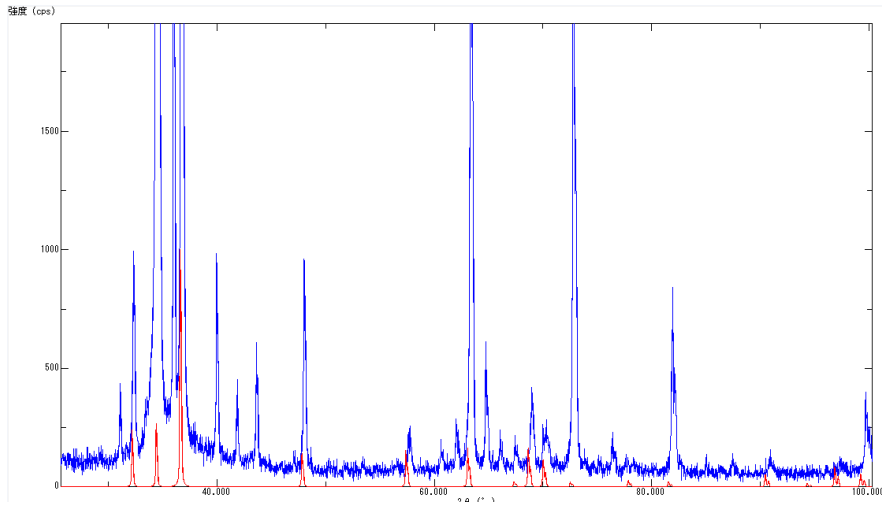


background削除は重要です。正確に削除するため、backgroundプロファイルを確認し

削除します。削除が不十分ではVF%に影響します。

3. r a n d o m成分を含むか？

θ / θ プロファイルの I C D D データ比較



青プロファイル：測定データ

赤プロファイル：CTR-DataBase-CreateProfile により I C D D から作成

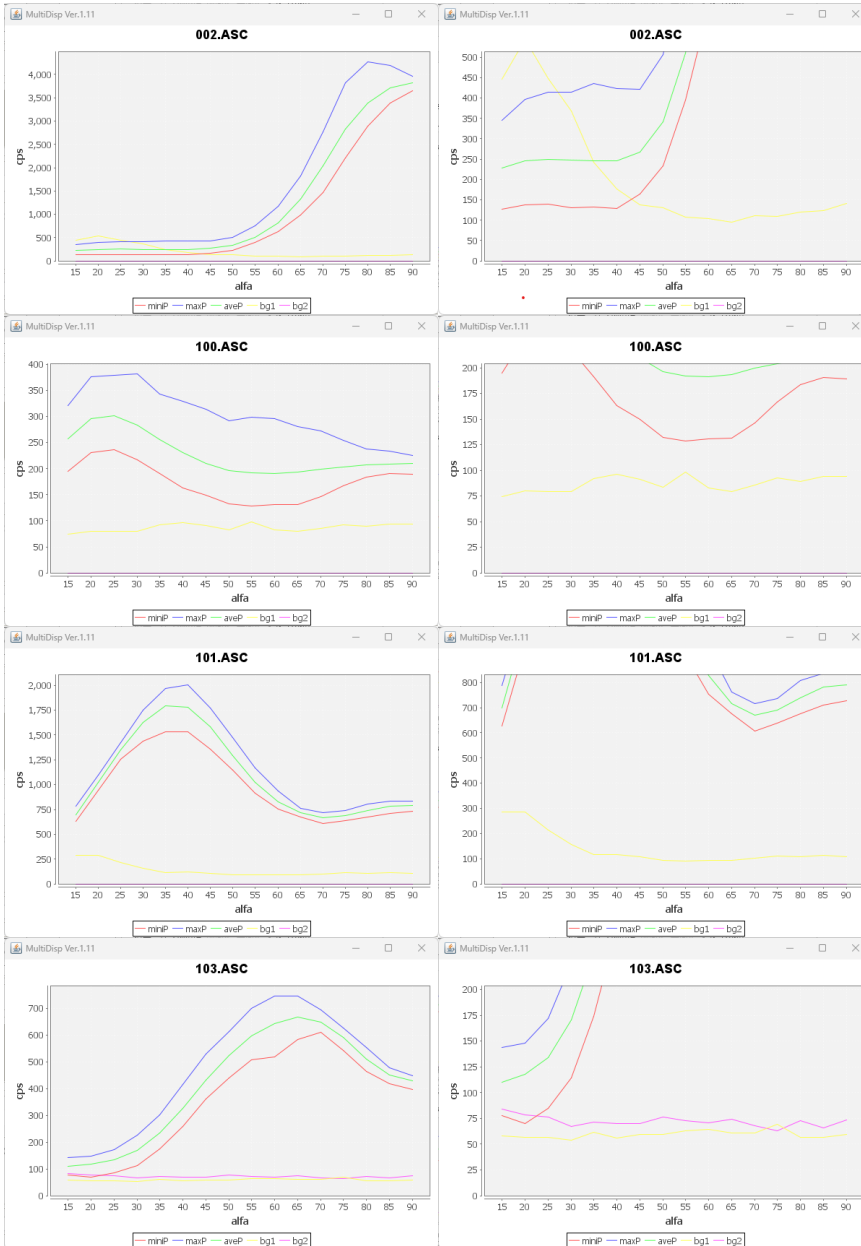
一致することから r a n d o m 成分が含まれています。

回折線が混みあっているため、 α 軸が崩れる極点図の外周ではバックグラウンド測定が難しい。

4. 極点処理 (background 削除、defocus 補正)

4.1 background プロファイルを確認しプロファイルの修正

4.1.1 background プロファイルの確認

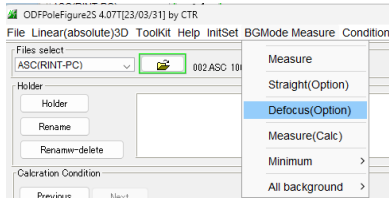


バックグラウンド曲線は、randomデータプロファイルの相似形になるはずですが。

右図、プロファイルの乱れがあります。

4. 1. 1 バックグラウンドの修正

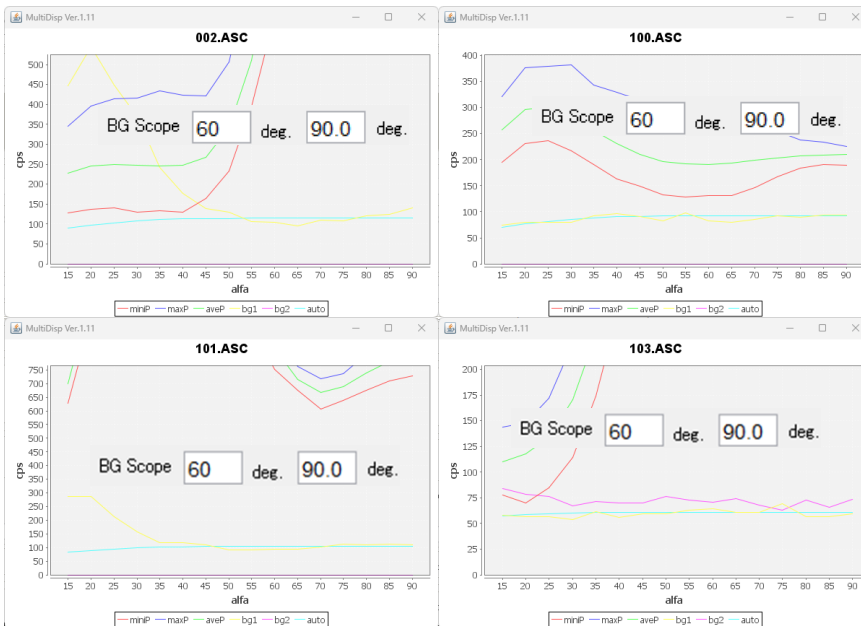
バックグラウンドは `defocus` の相似形から、測定された `background` に一致させる範囲を指定する



範囲指定で `defocus` に合わせる

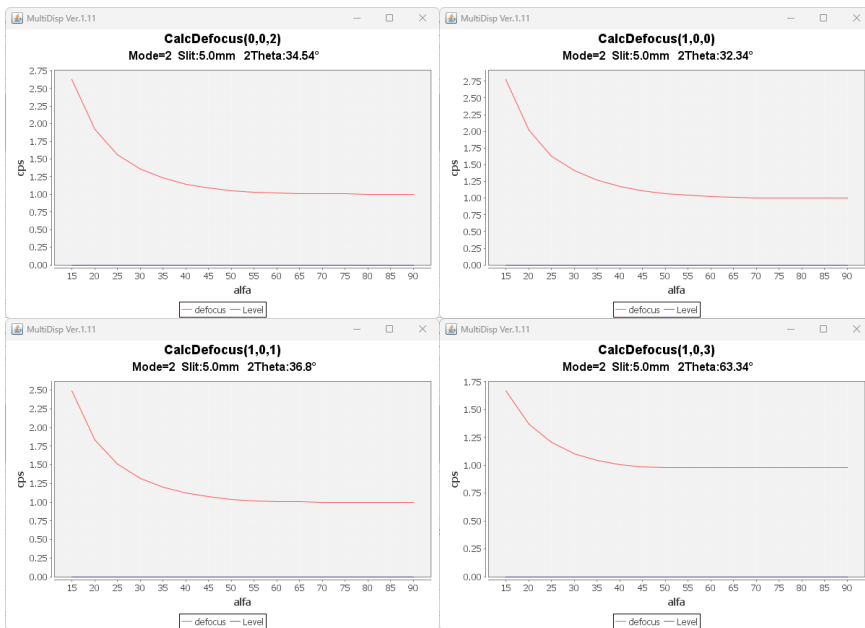
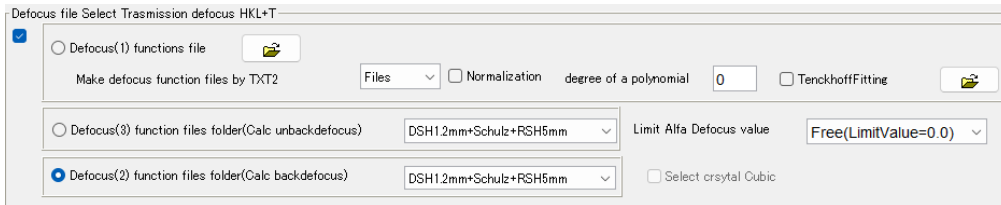
`defocus` 曲線は内部で計算しています。

一致させる範囲は、極点図毎に独立しています。

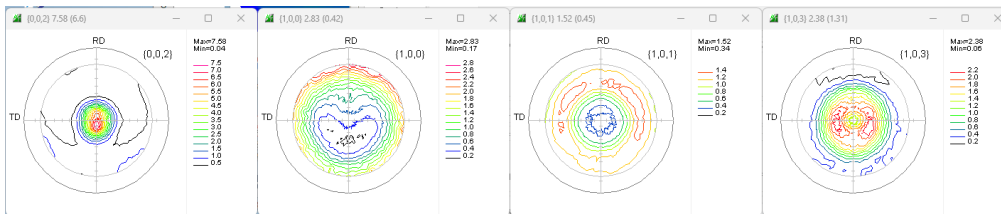


4.2 defocus 曲線

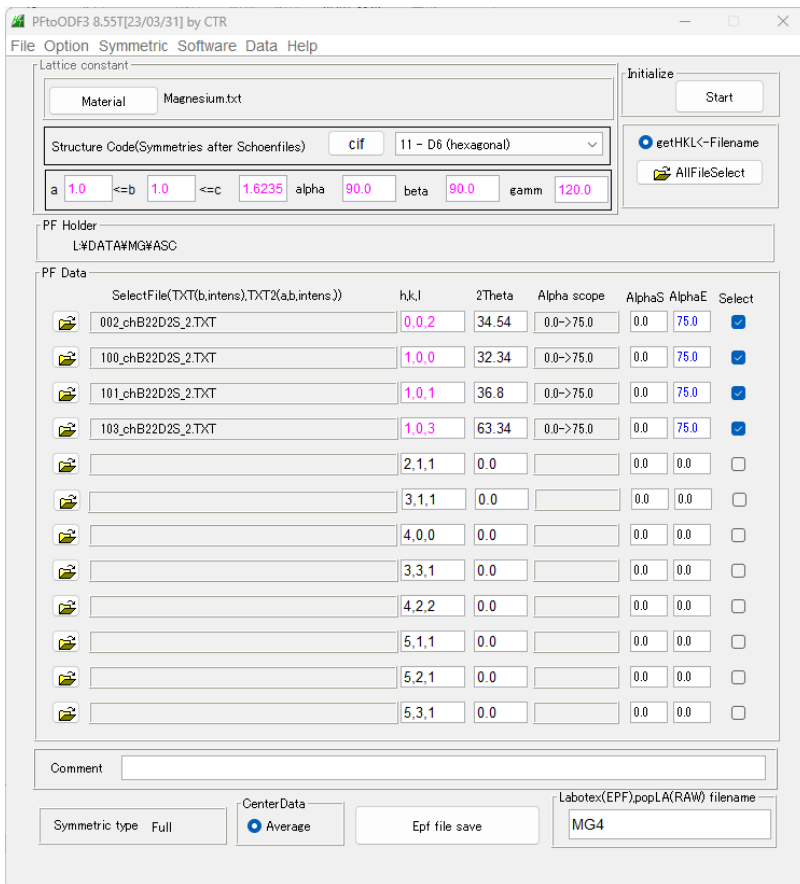
random 試料が得にくいので、計算で行う
受光スリット幅、測定 2θ 角度から補正曲線を計算



4.3 background 処理、defocus 補正、規格化处理



5. ODF 向けデータ作成



入力データ

002_chB22D2S_2.TXT	2023/02/05 8:13	テキスト文書
100_chB22D2S_2.TXT	2023/02/05 8:13	テキスト文書
101_chB22D2S_2.TXT	2023/02/05 8:13	テキスト文書
103_chB22D2S_2.TXT	2023/02/05 8:13	テキスト文書

ODF 向けファイル

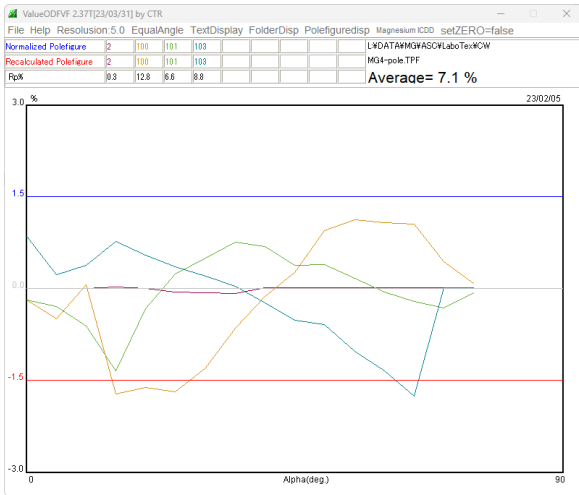
newODF	2023/02/05 8:17	ファイル フォルダー
popLA	2023/02/05 8:17	ファイル フォルダー
MTEX	2023/02/05 8:17	ファイル フォルダー
TexTools	2023/02/05 8:16	ファイル フォルダー
LaboTex	2023/02/05 8:16	ファイル フォルダー

6. random%の計算

予備ODF解析後、ODF図からGPOODFDisplayで計算

6.1 LaboTex

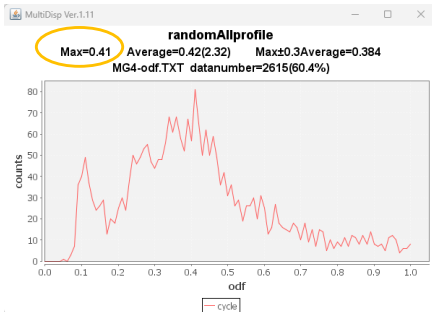
Rp%



ODF解析は問題ありません。

random%

分解能100

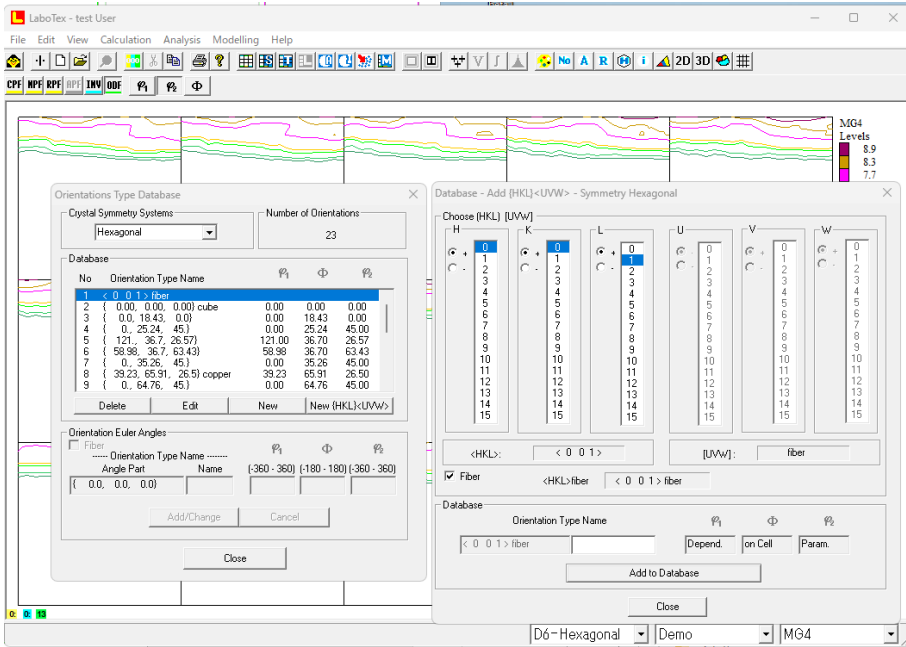


41%以下に乱れがあるが、最大値である41%を目指す。

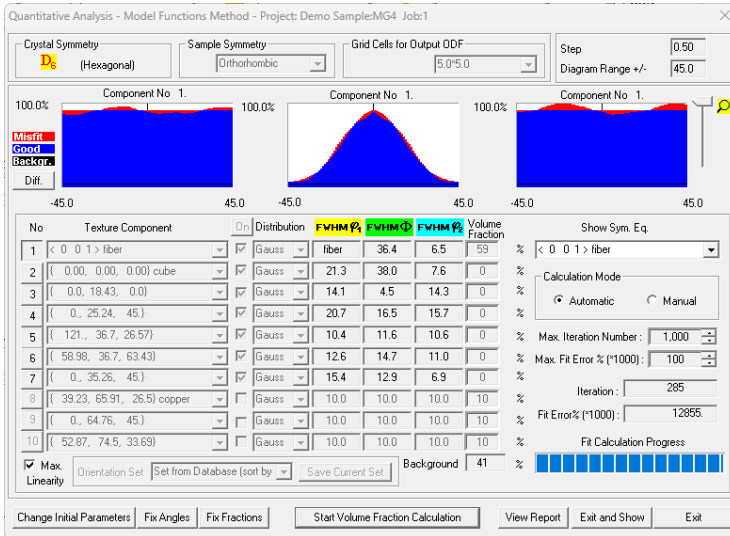
予測 random% → 41%

7. VolumeFractionの計算

7.1 LaboTex

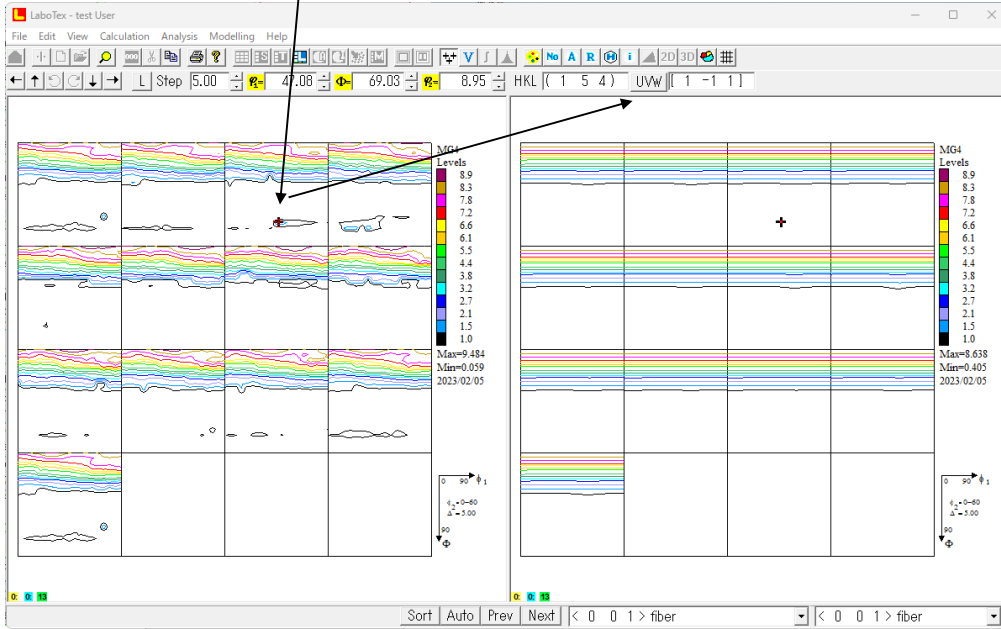


Fiberの要素があるため、Databaseに<0 0 1>Fiber追加



デフォルトの選択で、繰り返し検索、数値が安定したら ExitandShow

ODF比較、左図に方位の追加



LaboTex - test User

File Edit View Calculation Analysis Modelling Help

Step [5.00] R- [47.08] R- [69.03] R- [8.95] HKL [(1 5 4)] UVW [(1 -1 1)]

Database - Add [HKL]<UVW> - Symmetry Hexagonal

Choose [HKL] [UVW]

H	K	L	U	V	W
0	0	0	0	0	0
1	1	1	1	1	1
2	2	2	2	2	2
3	3	3	3	3	3
4	4	4	4	4	4
5	5	5	5	5	5
6	6	6	6	6	6
7	7	7	7	7	7
8	8	8	8	8	8
9	9	9	9	9	9
10	10	10	10	10	10
11	11	11	11	11	11
12	12	12	12	12	12
13	13	13	13	13	13
14	14	14	14	14	14
15	15	15	15	15	15

[HKL]: [1 5 4] [UVW]: [1 -1 1]

Fiber [HKL][UVW] [1 5 4][1 -1 1]

Database

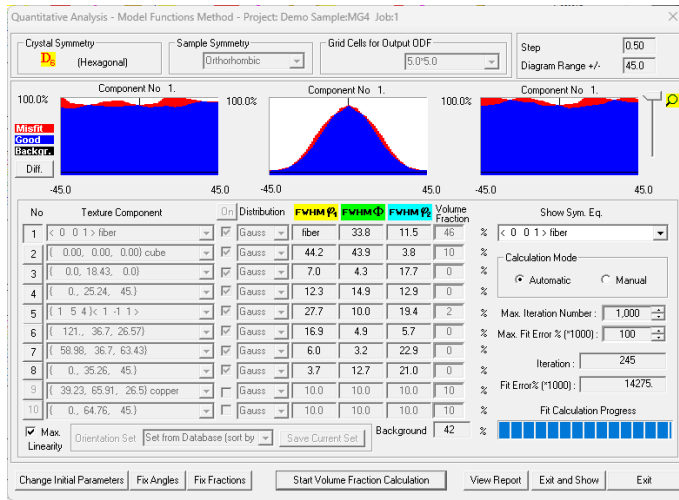
Orientation Type Name φ_1 Φ φ_2

[1 5 4]< 1 -1 1> Depend. on Cell Param.

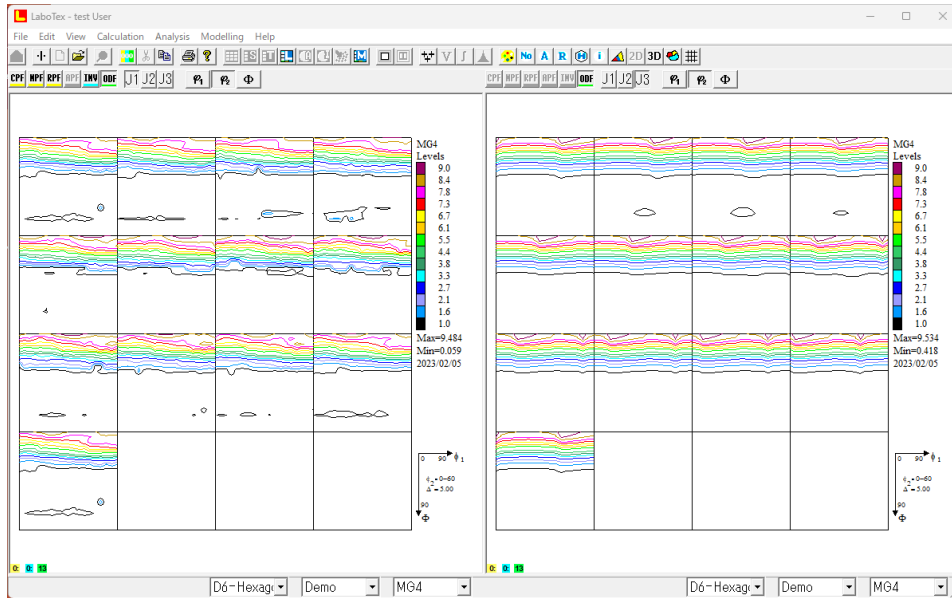
Add to Database

Close

再検索

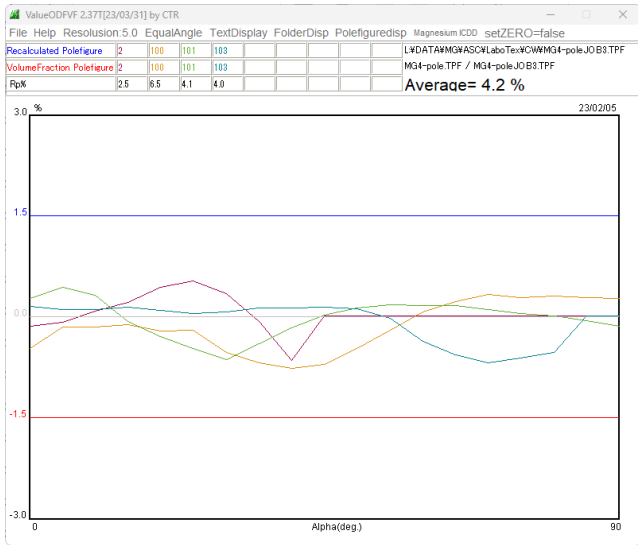


予測 R p % = 41 %、安定したら終了



極点図、ODF図を Export し評価

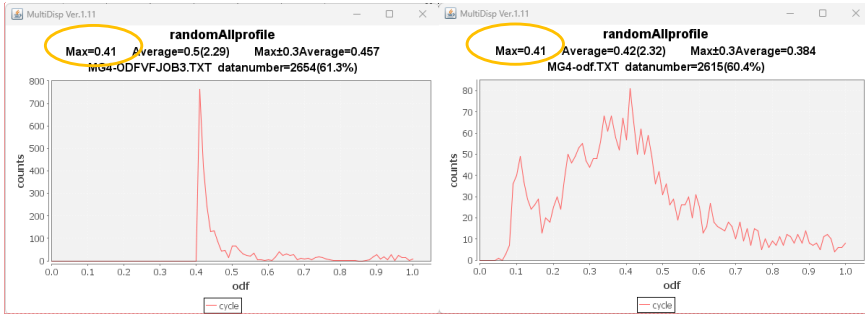
入力極点図から計算したODFの再計算極点図とVF%の極点図比較



予測した random%と比較

VolumeFraction

予測した random%



一致を確認

コメントの追加 [yy1]:

LaboTex最終VolumeFraction

< USER > test.LAB > D6-Hexagonal.LAB > Demo.LAB > MG4.LAB > Job03

Job03の検索

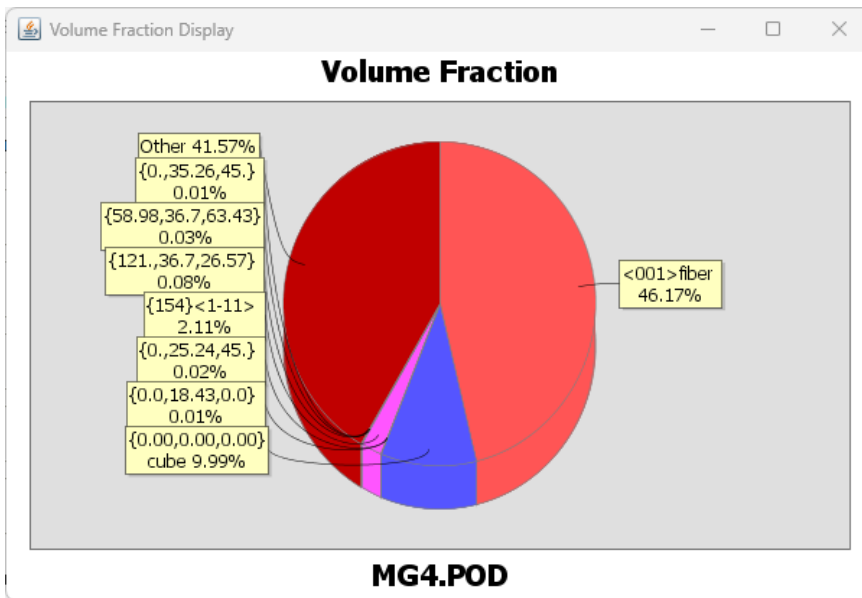
名前	更新日時	種類
MG4.APF	2023/02/05 9:15	APF ファイル
MG4.ODF	2023/02/05 9:12	ODF ファイル
MG4.POD	2023/02/05 9:13	POD ファイル

MG4.POD - メモ帳

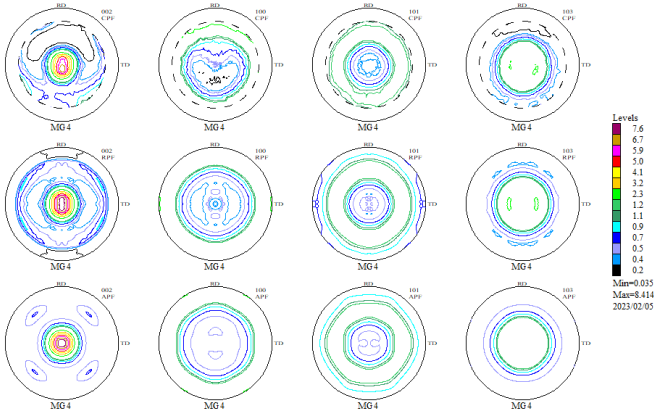
ファイル 編集 表示

LaboTex - Texture - Quantitative Analysis Report
 User: test
 Project: Demo
 Sample: MG4
 Job: 3
 Date: 2023/02/05
 Time: 09:13:30

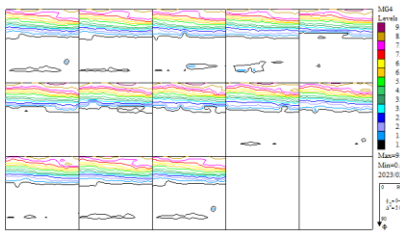
Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1	- Distribution :Gauss			
48.17	fiber	33.8	11.5	< 0 0 1 > fiber
Component No 2	- Distribution :Gauss			
9.99	44.2	43.9	3.8	(0.00, 0.00, 0.00) cube
Component No 3	- Distribution :Gauss			
0.01	7.0	4.3	17.7	(0.0, 18.43, 0.0)
(Low limit. Consider excluding this component)				
Component No 4	- Distribution :Gauss			
0.02	12.3	14.9	12.9	(0., 25.24, 45.)
Component No 5	- Distribution :Gauss			
2.11	27.7	10.0	19.4	(1 5 4) < 1 -1 1 >
Component No 6	- Distribution :Gauss			
0.08	16.9	4.9	5.7	(121., 36.7, 26.57)
Component No 7	- Distribution :Gauss			
0.03	8.0	3.2	22.9	(58.98, 36.7, 63.43)
Component No 8	- Distribution :Gauss			
0.01	3.7	12.7	21.0	(0., 35.26, 45.)
(Low limit. Consider excluding this component)				
41.57	Background Volume Fraction			



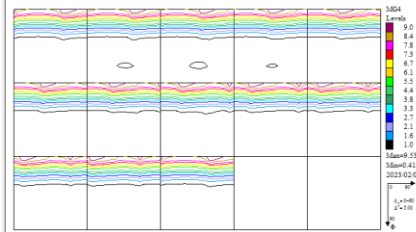
極点図 (上段：入力極点図、中段：ODF 解析、下段：VF%結果)



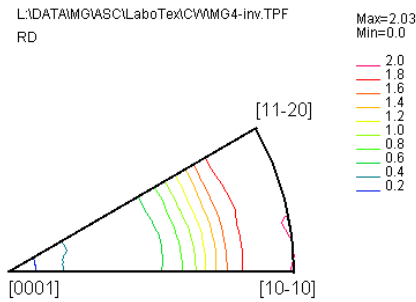
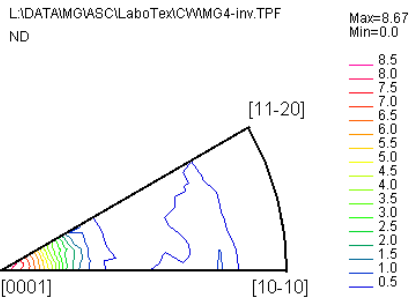
ODF 解析結果



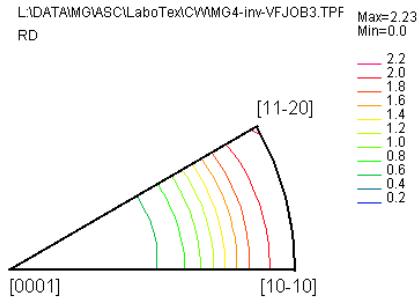
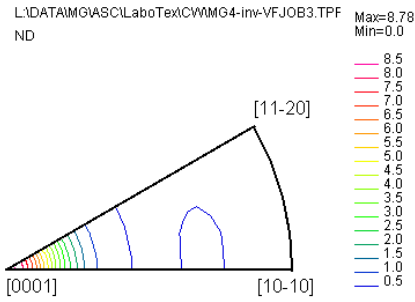
VolumeFraction 結果



ODF 解析結果



VolumeFraction 結果



8. まとめ

V o l u m e F r a c t i o n 解析結果の報告は少ないが、正確なデータ処理により ODF 解析結果から評価できます。

r a n d o m が含まれていない場合、VF%の残差がゼロを目指し、r a n d o m が含まれている場合、予め r a n d o m % を計算し、VF%結果の残差が r a n d o m % との一致を目指せば、最終打ち切り判断が可能になります。