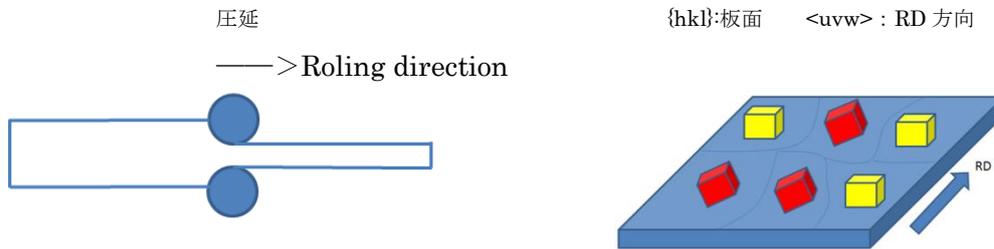


# 極点処理から ODF 解析のチュートリアル

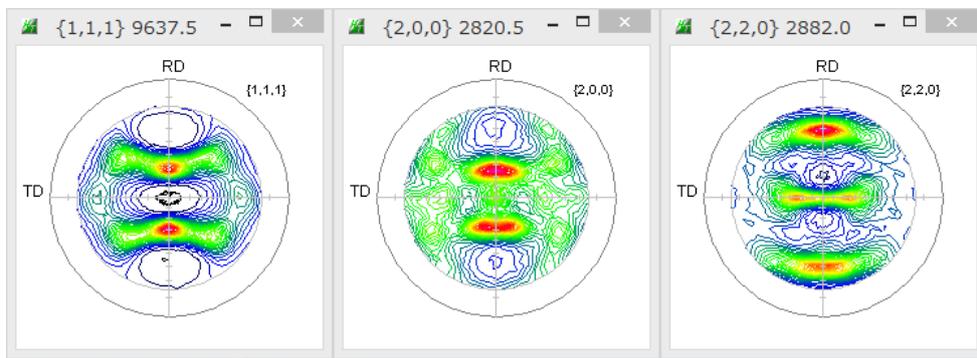
LaboTex 編 (規格化は `KearnsMethod`)

異方性も材料特性に影響します。異方性の表現方法として、結晶方位  $\{hkl\}\langle uvw \rangle$  があります。

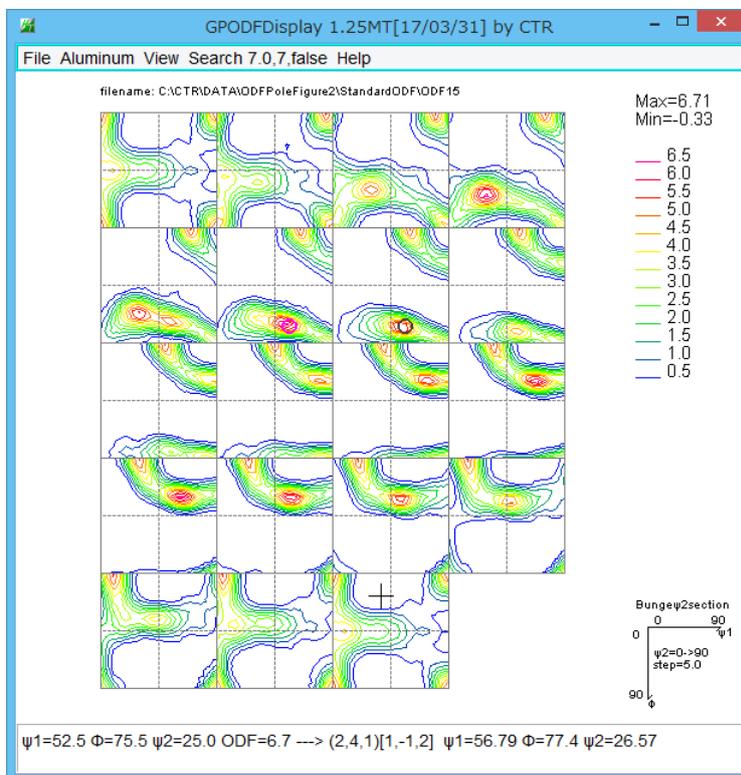
極点図から結晶方位計算に関して `LaboTtex` を用いて説明します。



極点図



ODF 解析から求められる ODF 図 (結晶方位図)



結晶方位図から  $\{hkl\}\langle uvw \rangle$  を求める。

CTR パッケージソフトウェアと `LaboTex` を使用します。

極点図から{hkl}<uvw>を求める過程は

極点図のデータ処理（バックグラウンド除去、RD 補正、吸収補正、defocus 補正、平滑化）

ODF 解析ファイル作成

ODF 解析

ODF 解析 Error 評価

{hkl}<uvw>の決定と VolumeFraction 算出

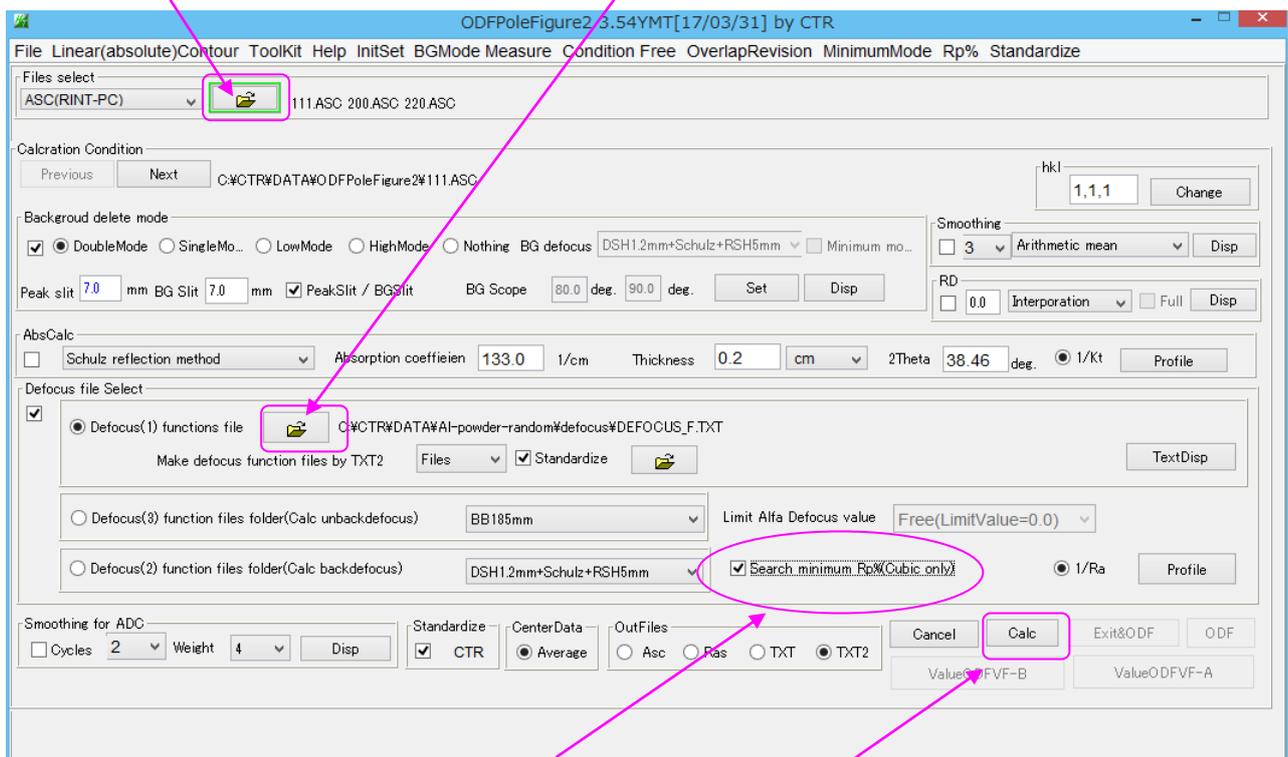
があります。

例 C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2 の Aluminum 極点図を処理する

### 1. 極点図処理

測定データの選択

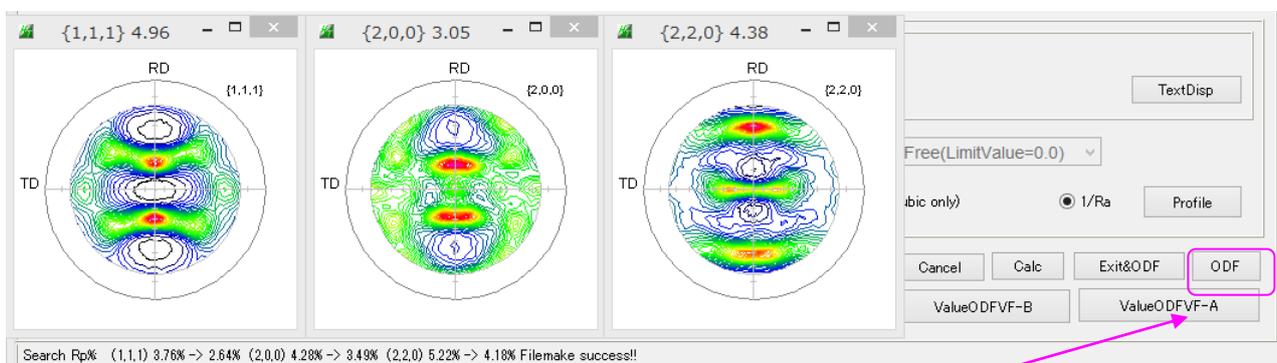
defocus ファイル指定



最適化 Rp%

極点処理を開始

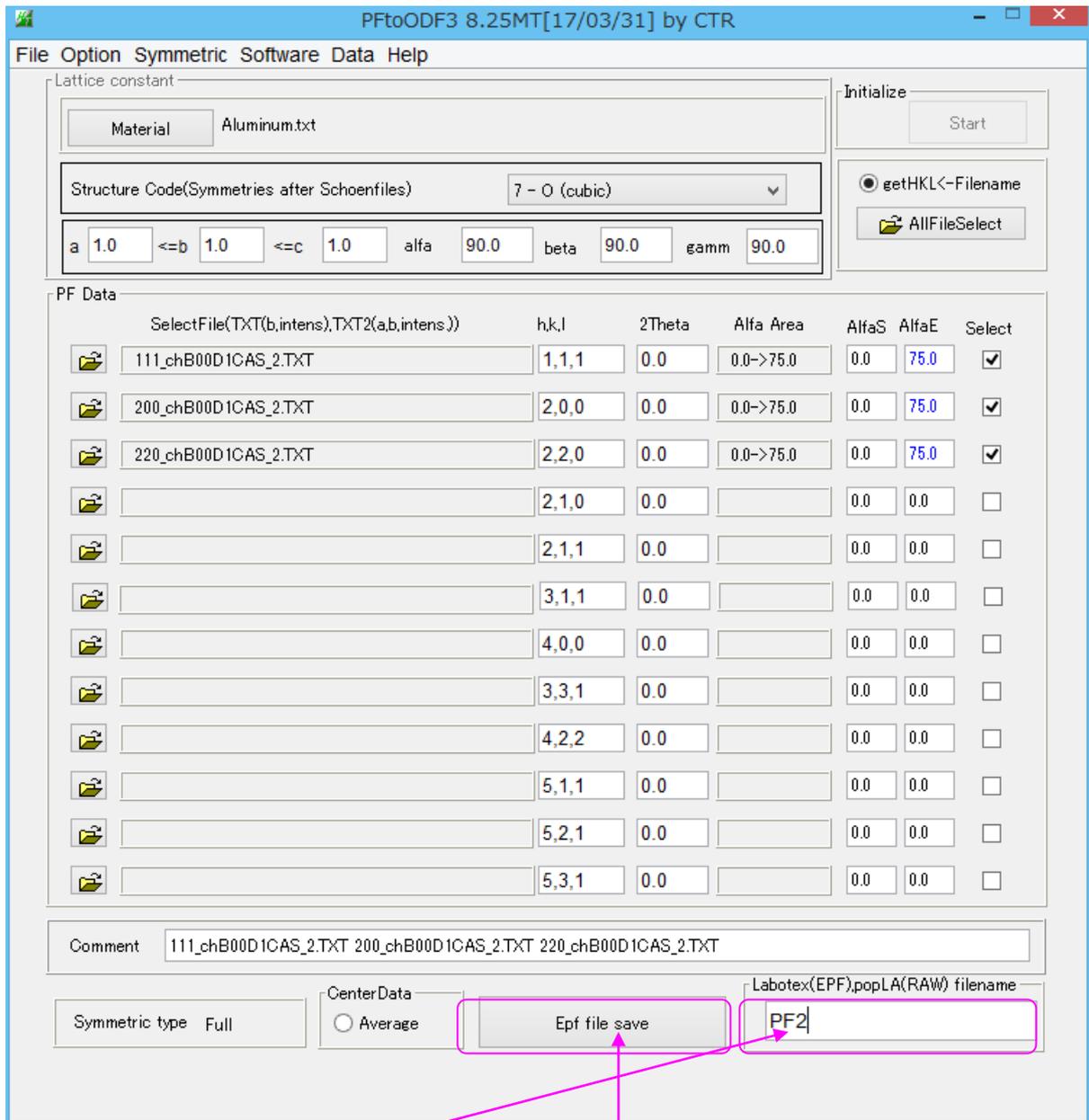
極点処理した極点図が表示されます。



ODF 解析のためのファイル作成画面を作成

## 2. ODF解析ファイル作成

極点データ処理したファイルが表示されている



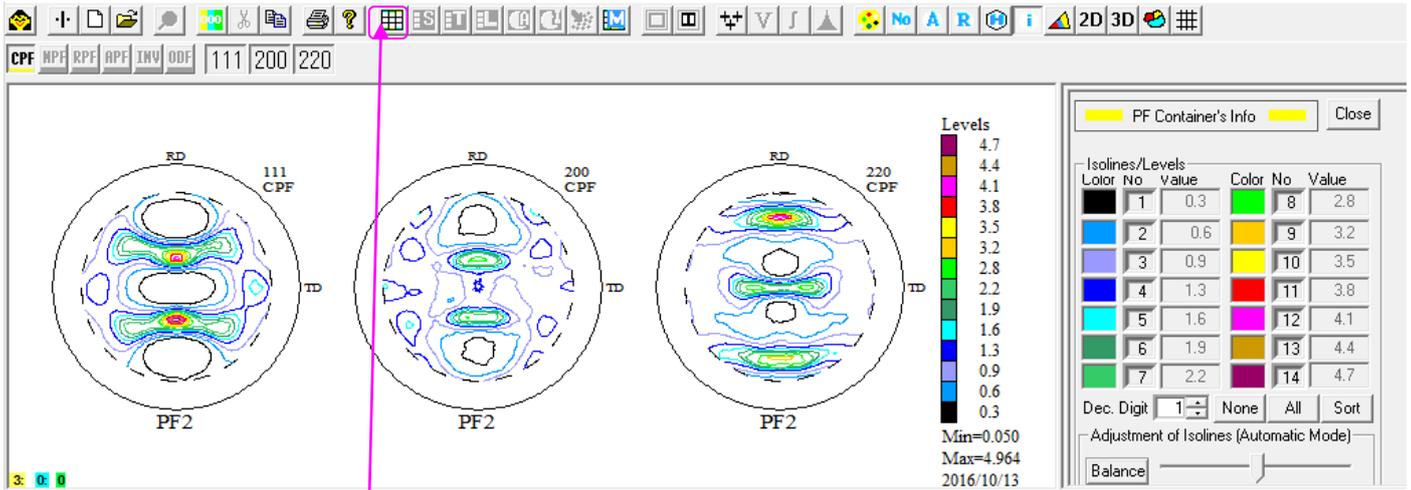
作成するファイル名を入力し、E p f ファイルを作成

|                  |                  |            |       |
|------------------|------------------|------------|-------|
| CTRODF           | 2016/10/13 4:23  | ファイル フォルダ  |       |
| StandardODF      | 2016/10/13 5:42  | ファイル フォルダ  |       |
| LaboTex          | 2016/10/13 7:44  | ファイル フォルダ  |       |
| 200              | 2012/07/25 10:15 | RINT2000アキ | 22 KB |
| 220              | 2012/07/25 10:15 | RINT2000アキ | 22 KB |
| 311              | 2012/07/25 10:15 | RINT2000アキ | 22 KB |
| 111              | 2012/07/25 10:15 | RINT2000アキ | 22 KB |
| 111_chB00D1CAS_2 | 2016/10/13 5:20  | テキスト文書     | 26 KB |
| 200_chB00D1CAS_2 | 2016/10/13 5:20  | テキスト文書     | 26 KB |
| 220_chB00D1CAS_2 | 2016/10/13 5:20  | テキスト文書     | 26 KB |

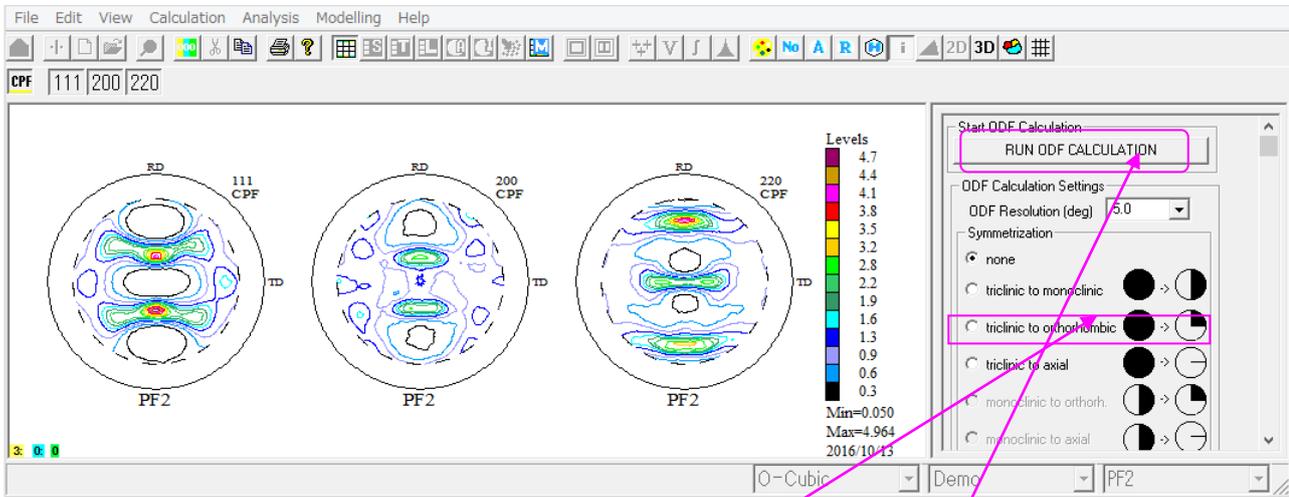
LaboTex ホルダ以下にファイルが作成されます。

このファイルを LaboTex で読み込みます。

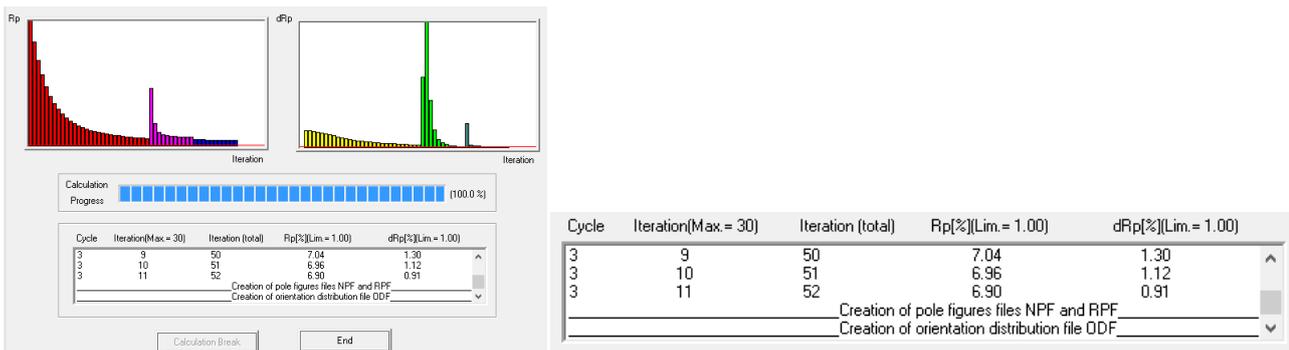
### 3. ODF 解析



ODF 解析はこのメニューから入ります。



1/4 対称操作で、ODF 解析を行う。



Rp%が6.9%で計算されています。

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

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

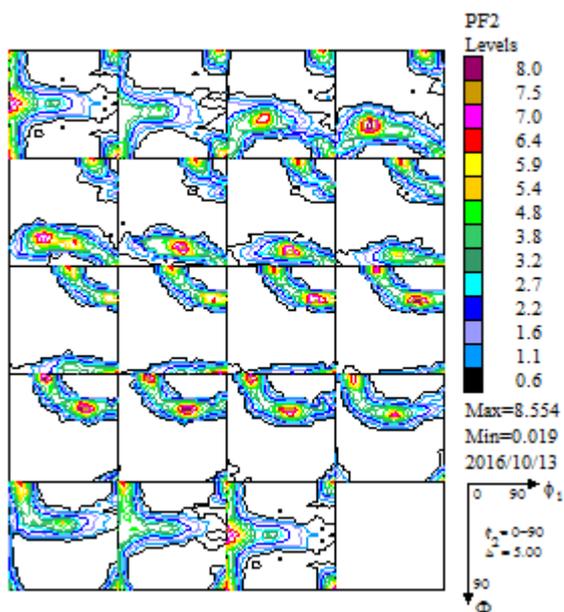
$\{PF_{exp.}\}_i$  - intensity of experimental (corrected and normalized) pole figure in point i,

$\{PF_{calc.}\}_i$  - intensity of calculated pole figure in point i,

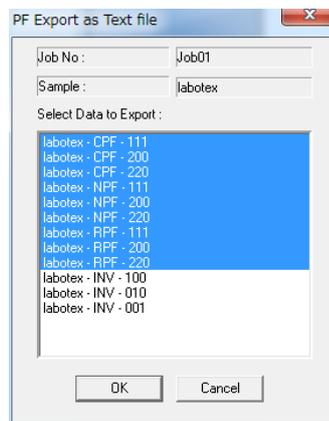
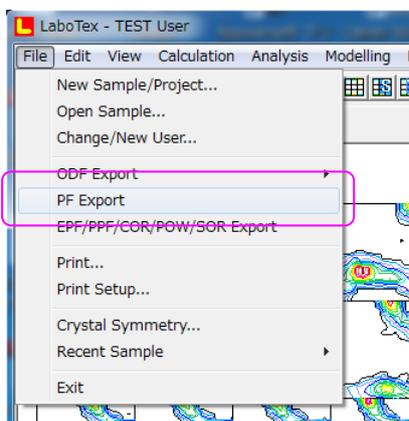
N - number of measured points on pole figure.

$$RP = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M RP_{\{hkl\}_j}$$

## ODF 図

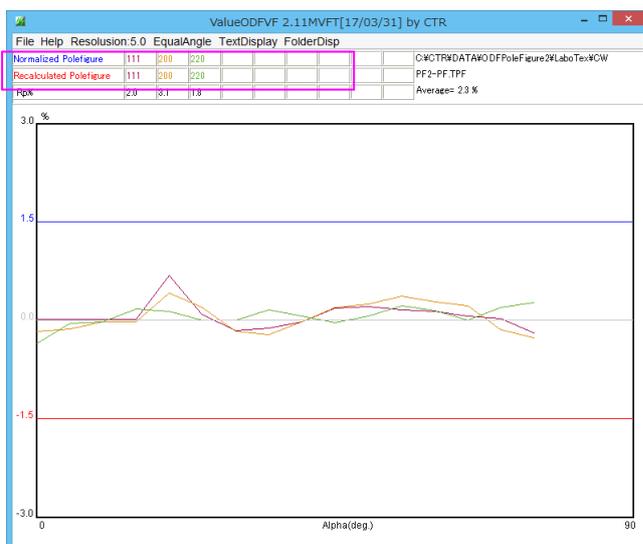


## 5. ODF 解析結果から Error の評価



入力極点図と再計算極点図を Export します。

Export したファイルを ValueODF-VF ソフトウェアで読み込み



```
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\LaboTex\CW
PF2-PF.TPF
Average= 2.3 %
```

通常、LaboTex の Rp% より少ない値が計算されます。  
ValueODF-VF ソフトウェアでは計算限界値により、小さな極密度は計算に含めていません。

グラフは  $\alpha$  軸に対する、Rp% の挙動を表現しています。

± 1.5% を超えたり、プロフィールの右側付近 (defocus 補正量の大きい部分) をチェックします。このデータでは異常ありません。

## 5. {hkl}<uvw>の決定と VolumeFraction



メニューから VolumeFraction

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:PF2 Job:1

Crystal Symmetry: (Cubic) Sample Symmetry: Orthorhombic Grid Cells for Output ODF: 5.0\*5.0 Step: 0.50 Diagram Range +/-: 45.0

Centre of Orientation (3 plots) FWHM  $\phi_1$  = 10.0 FWHM  $\phi_2$  = 10.0 FWHM  $\phi_3$  = 10.0

| No | Texture Component           | On                                  | Distribution | FWHM $\phi_1$ | FWHM $\phi_2$ | FWHM $\phi_3$ | Volume Fraction | Show Sym. Eq.        |
|----|-----------------------------|-------------------------------------|--------------|---------------|---------------|---------------|-----------------|----------------------|
| 1  | { 1 1 0 } < 0 0 1 > goss    | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 15 %            | { 1 0 1 } < 5 2 -5 > |
| 2  | { 0 0 1 } < 1 0 0 > cube    | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 15 %            |                      |
| 3  | { 0 1 3 } < 1 0 0 >         | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 12 %            |                      |
| 4  | { 0 1 6 } < 0 -6 1 >        | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 8 %             |                      |
| 5  | { 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass  | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 8 %             |                      |
| 6  | { 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1    | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 8 %             |                      |
| 7  | { 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 8 %             |                      |
| 8  | { 1 1 0 } < 1 -1 1 >        | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 8 %             |                      |
| 9  | { 1 2 3 } < 4 1 -2 > R      | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 8 %             |                      |
| 10 | { 1 0 1 } < 5 2 -5 >        | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 10.0          | 10.0          | 10.0          | 5 %             |                      |

Max. Linearity:  Orientation Set: Set from Database (sort by) Save Current Set Background: 5 %

Buttons: Fix Initial Parameters Start Volume Fraction Calculation Exit Exit and Show

VolumeFraction 計算を start

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:PF2 Job:1

Crystal Symmetry: (Cubic) Sample Symmetry: Orthorhombic Grid Cells for Output ODF: 5.0\*5.0 Step: 0.50 Diagram Range +/-: 45.0

Centre of Orientation (3 plots) Misfit Good Backgr. Diff. -45.0 45.0 -45.0 45.0 -45.0 45.0

| No | Texture Component           | On                                  | Distribution | FWHM $\phi_1$ | FWHM $\phi_2$ | FWHM $\phi_3$ | Volume Fraction | Show Sym. Eq.            |
|----|-----------------------------|-------------------------------------|--------------|---------------|---------------|---------------|-----------------|--------------------------|
| 1  | { 1 1 0 } < 0 0 1 > goss    | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 31.8          | 20.1          | 19.9          | 14 %            | { 0 0 1 } < 1 0 0 > cube |
| 2  | { 0 0 1 } < 1 0 0 > cube    | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 15.0          | 20.0          | 16.6          | 7 %             |                          |
| 3  | { 0 1 3 } < 1 0 0 >         | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 19.5          | 21.3          | 19.6          | 10 %            |                          |
| 4  | { 0 1 6 } < 0 -6 1 >        | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 31.7          | 33.1          | 33.4          | 6 %             |                          |
| 5  | { 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass  | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 23.8          | 20.4          | 19.3          | 9 %             |                          |
| 6  | { 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1    | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 19.3          | 19.9          | 19.3          | 16 %            |                          |
| 7  | { 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 21.4          | 19.3          | 24.2          | 9 %             |                          |
| 8  | { 1 1 0 } < 1 -1 1 >        | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 20.0          | 29.0          | 26.6          | 8 %             |                          |
| 9  | { 1 2 3 } < 4 1 -2 > R      | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 19.6          | 19.8          | 24.2          | 10 %            |                          |
| 10 | { 1 0 1 } < 5 2 -5 >        | <input checked="" type="checkbox"/> | Gauss        | 22.6          | 25.3          | 24.2          | 4 %             |                          |

Max. Linearity:  Orientation Set: Set from Database (sort by) Save Current Set Background: 7 %

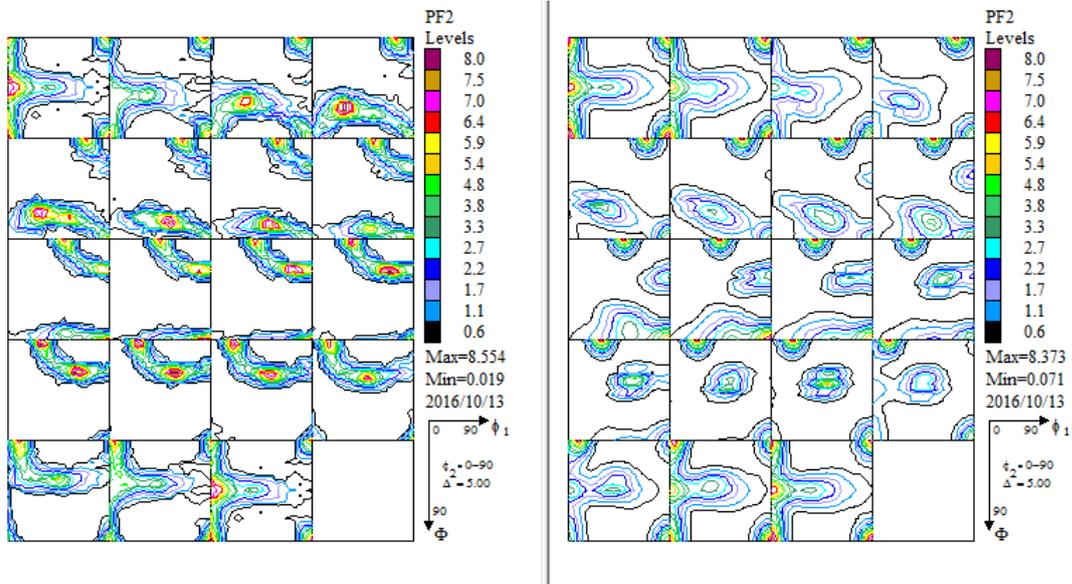
Iteration: 101 Fit Error% (\*1000): 57941. Fit Calculation Progress: [Progress Bar]

Buttons: Change Initial Parameters Start Volume Fraction Calculation Exit Exit and Show

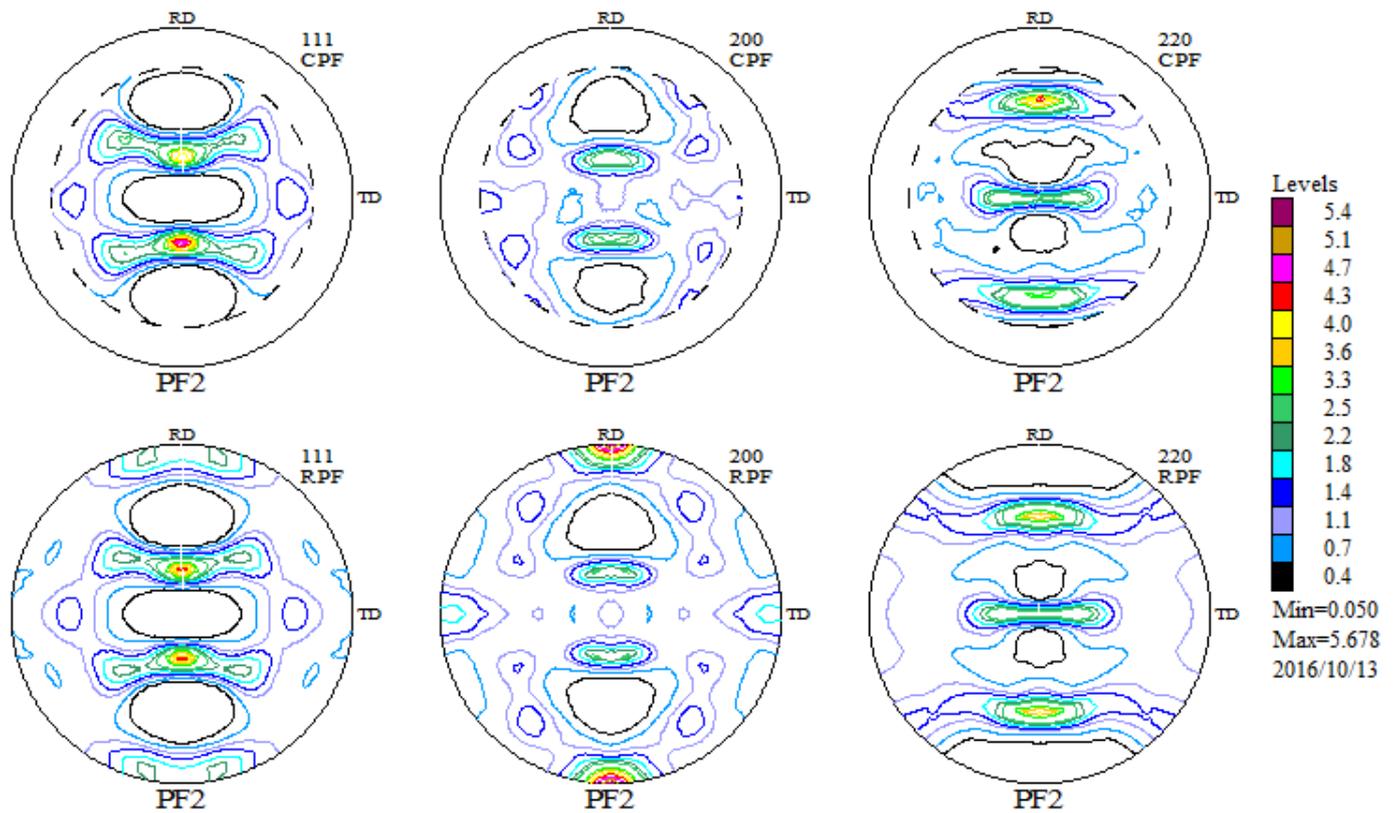
S 方位が大きな値になっているので、 $\beta$ -Fiber が発達しています。

入力極点図から計算した ODF 図

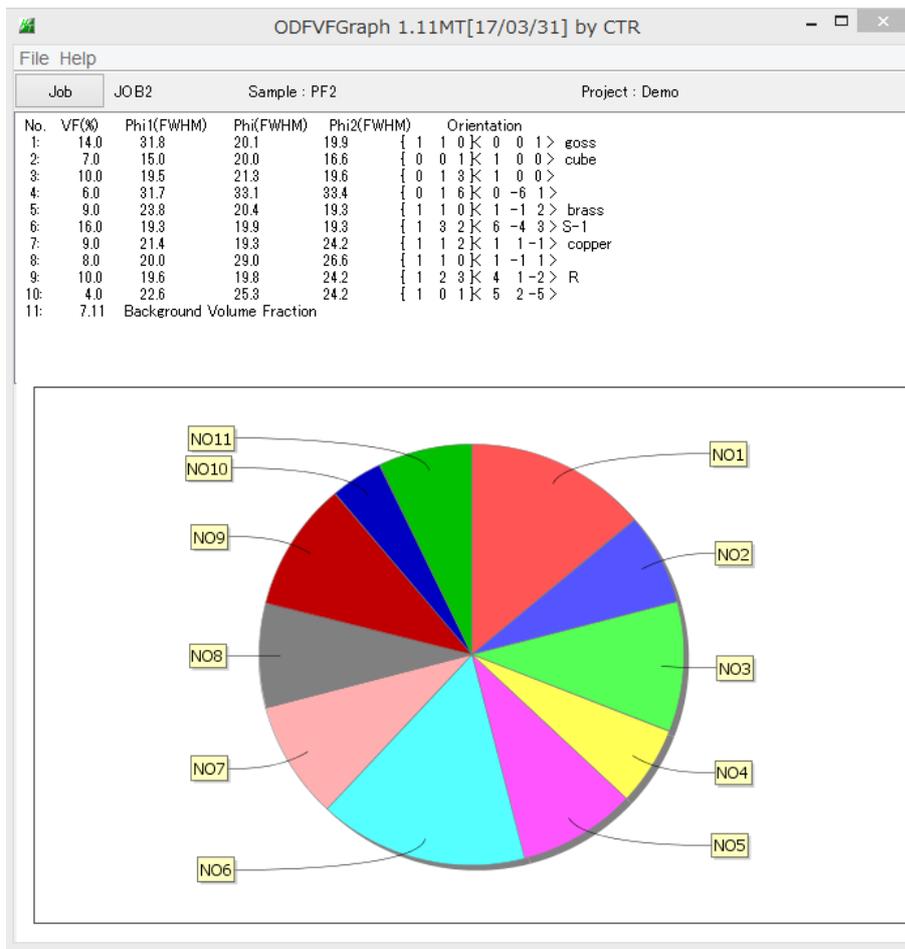
VolumeFraction 結果から計算した ODF 図



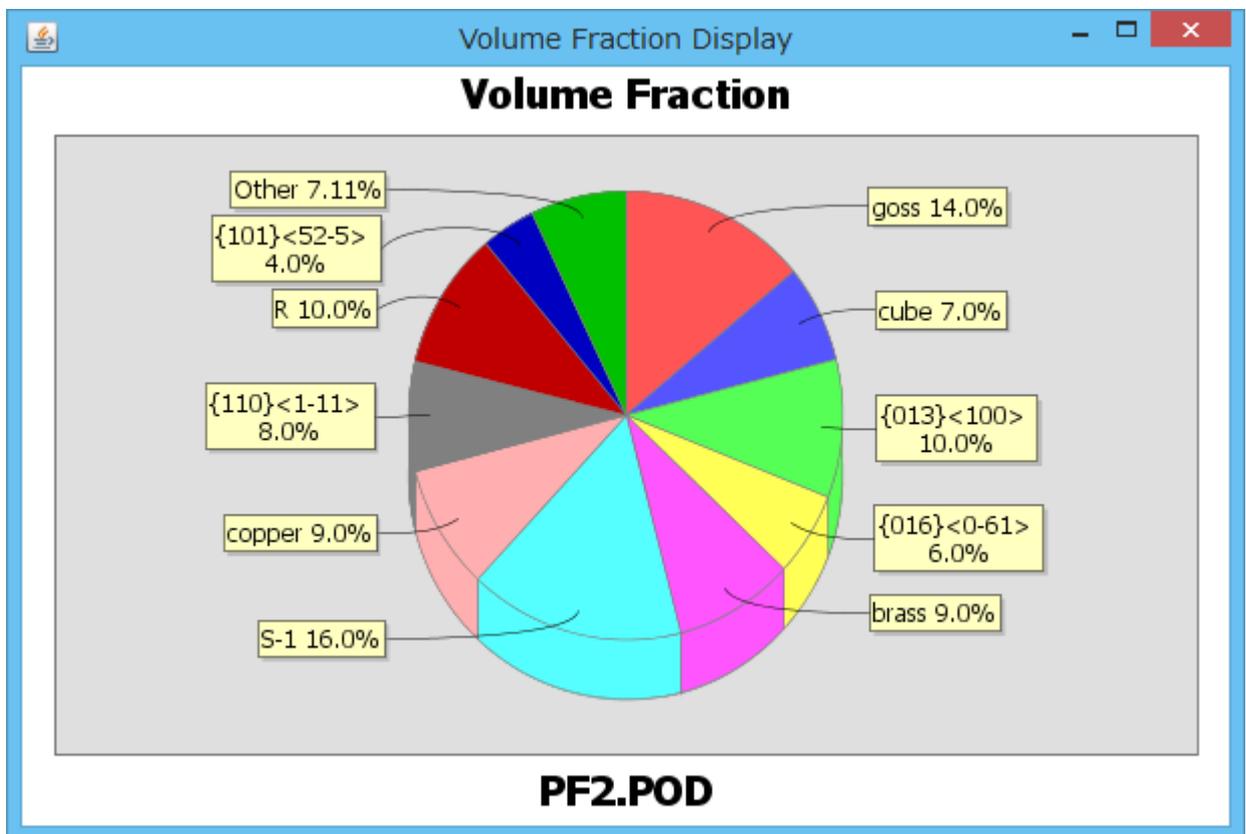
入力極点図と再計算極点図



VolumeFraction 結果の表示(ODFAfter->ODFVFGGraph プログラムで表示)



ODFAfter->CompareVolumeFraction プログラムで表示





7. 粒径の粗い材料の場合、ODF図の平滑化

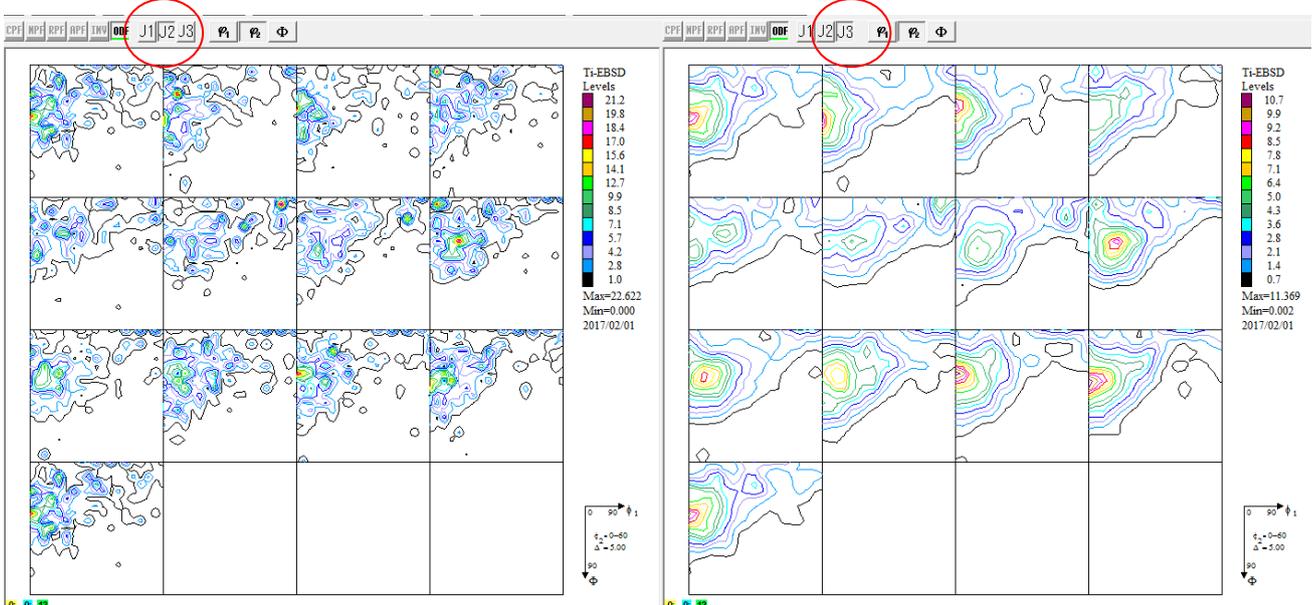
平滑化したODF図から極点図、逆極点図、VolumeFraction 計算も可能になります。

以下は EBSD データを読み込み、ODF 図の平滑化を行った例

EBSD データから解析 Job1、

Job1(Triclinic)→Job2(Orthorombic)

J o b 2 → LaboTexODFFile ソフトウェアで平滑化し Job3 を作成



再計算極点図比較 (上段 : Job1 (Triclinic) ,中段 : Job2 (Orthorombic) ,下段 : Job3(平滑化))

