

LaboTex による

XRDによるVolume Fraction

2025年07月20日

HelperTex Office

概要

XRDによる方位に関して、従来は方位密度の大小を扱っていたがこの方法は定量的でない事が以下の資料で知られている。

Table I. Standard Texture of Spherical Components with Gaussian Distribution ($b = 12.5$ Deg) and Its Multiplicity (Cubic/Orthorhombic) in the $90 \times 90 \times 90$ Deg Region

Miller Index {hkl}<uvw>	Euler Angles		ODF (Maximum at Exact Position)	Multiplicity (m)
	{ $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ }	{ α, β, γ }		
Bs, {110}<112>	{35.26 deg, 45 deg, 0 deg}	{54.74 deg, 45 deg, 0 deg}	130.95	2
Copper, {112}<111>	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2
S {123}<634>	{58.98 deg, 36.7 deg, 63.44 deg}	{31.02 deg, 36.7 deg, 26.57 deg}	56.89	1
Goss, {110}<001>	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
Cube, {001}<100>	{ $\varphi_1 + \varphi_2 = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\Phi = 0$ deg}	{ $\alpha + \gamma = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated cube, {001}<110>	{ $\varphi_1 + \varphi_2 = 45$ deg, 135 deg, $\Phi = 0$ deg}	{ $\alpha + \gamma = 45$ deg, 135 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated Goss, {110}<011>	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
{111}<112>	{90 deg, 54.75 deg, 45 deg}	{0 deg, 54.74 deg, 45 deg}	130.95	2
{112}<110>	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2

定量的に扱う場合、各種ODFソフトウェアによるVolume Fraction（体積分率）としてサポートされている。

手法は方位の広がり関数のFittingで計算が行われる。

一方、EBSDでは方位の定量として、面積分率が採用されている。方位許容差内の結晶粒子面積の積算から計算される。

この方法はLaboTexのIntegration Methodsと似ている手法である。

本資料では、

LaboTexの

Model Function Method

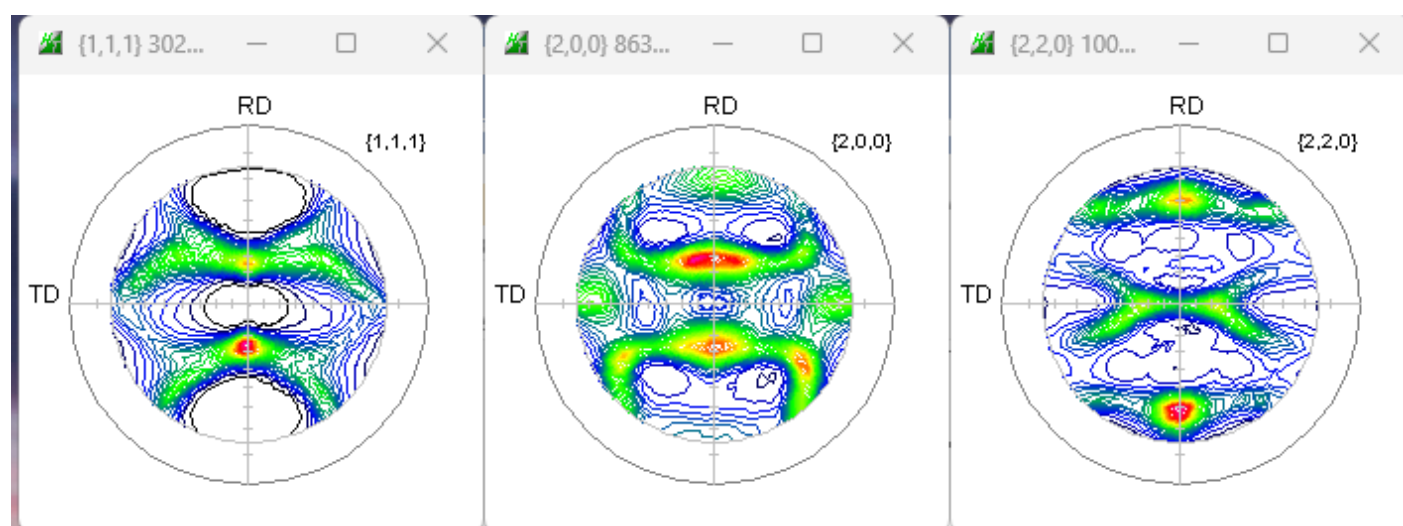
Integration Methods

に関して、評価してみます。

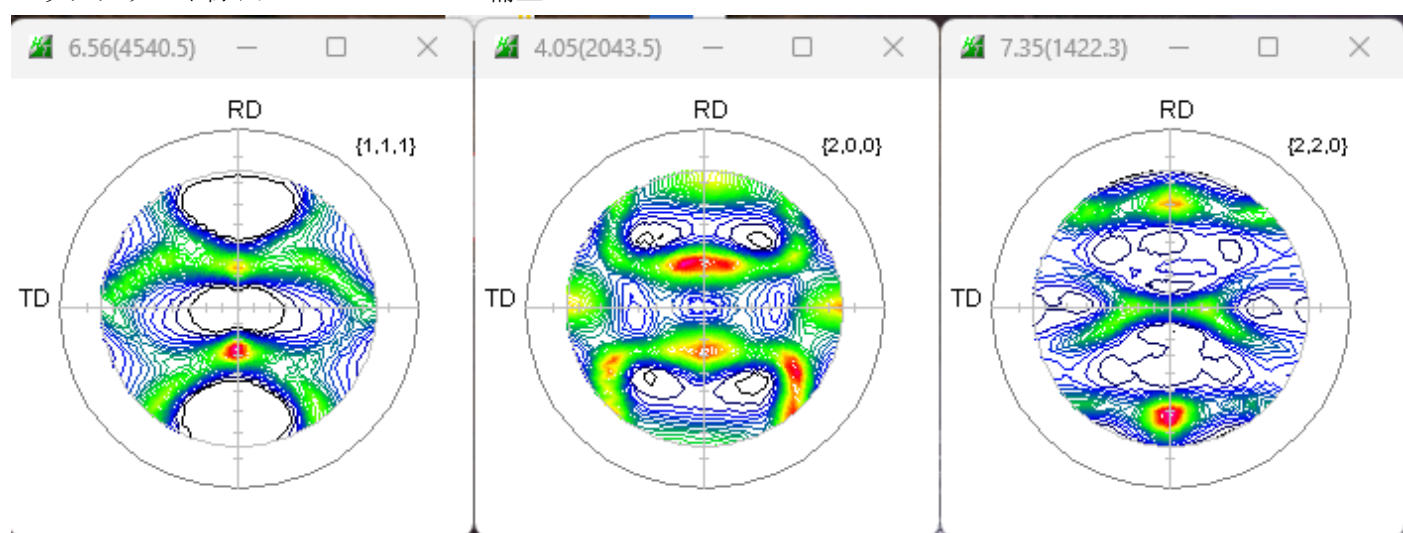
Volume Fractionを求める際、DataBaseに登録されている方位から可能性高い方位が自動的に選択されます。

測定データ

アルミニウムH材



バックグラウンド除去+defocus補正

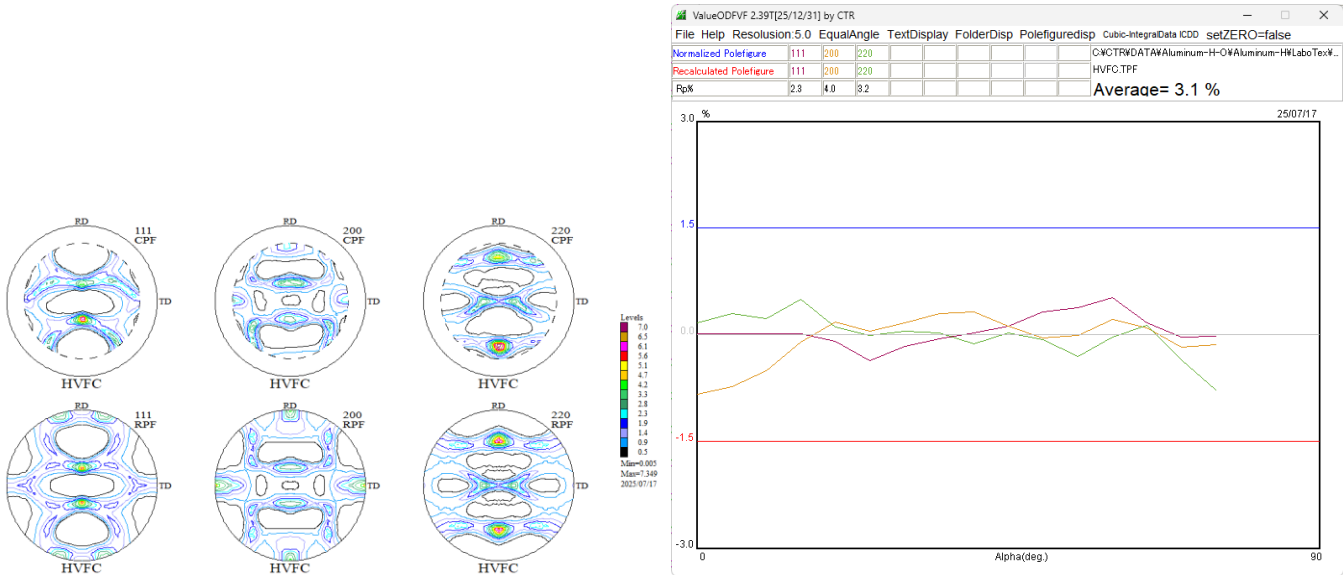


LaboTexによるODF解析

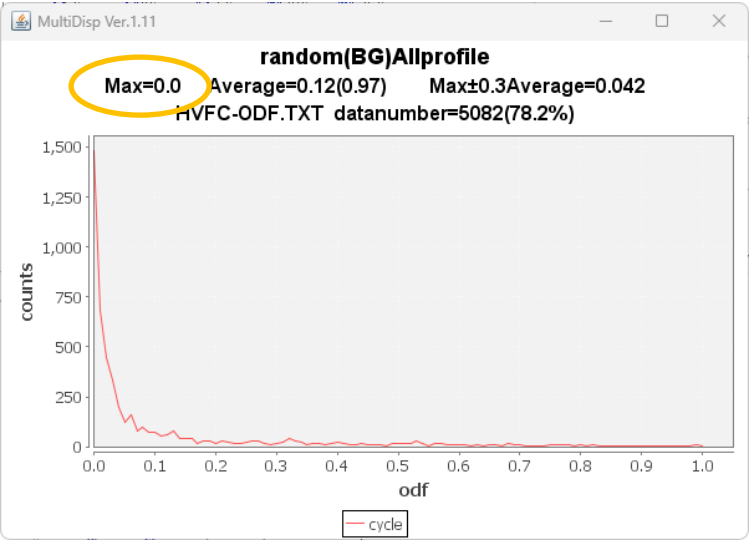
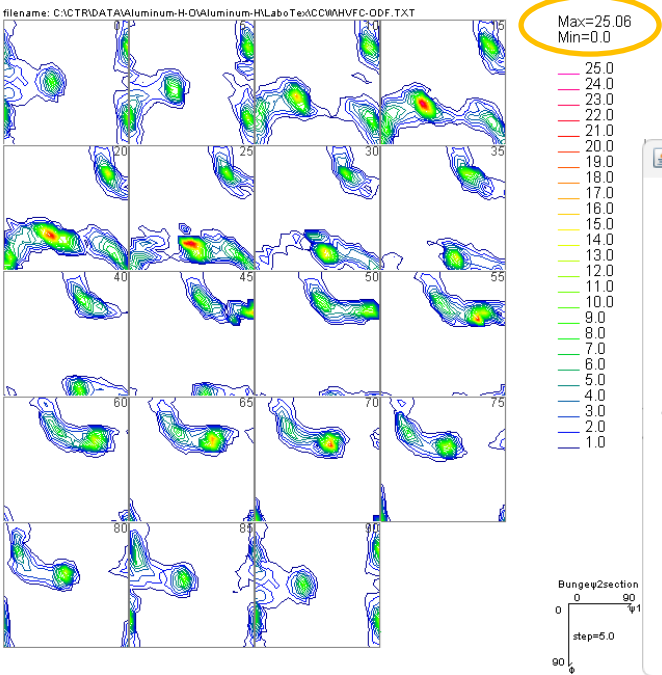
ODFF 解析時の Rp%と dRp% 測定時や補正のエラーが含まれる

Cycle	Iteration(Max. = 70)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 0.10)	dRp[%](Lim. = 0.10)
3	69	156	6.43	0.12
3	70	157	6.43	0.12
END OF ODF CALCULATION				
END OF ODF CALCULATION				
END OF ODF CALCULATION				

入力極点図と再計算極点図から defocus に関するエラーの確認



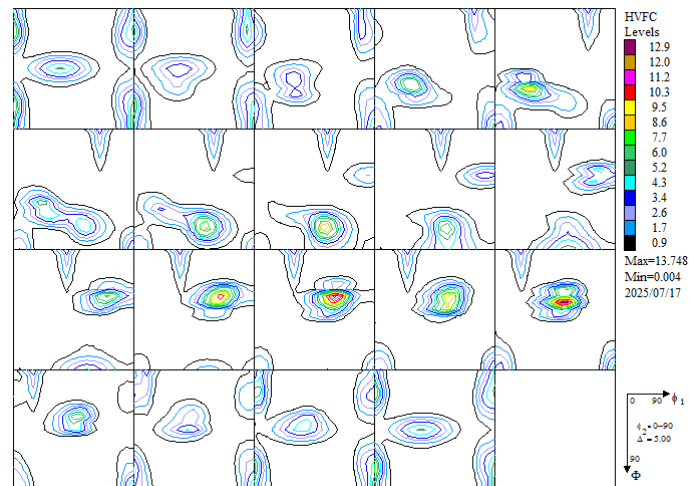
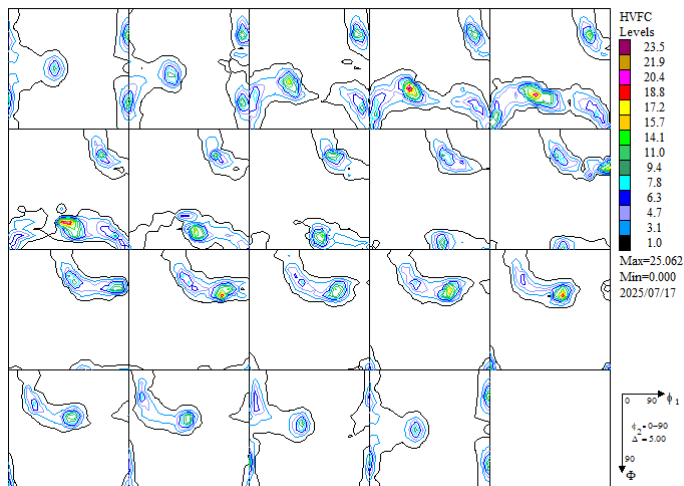
大きなエラーは含まれていない



random 成分は含まれていない。

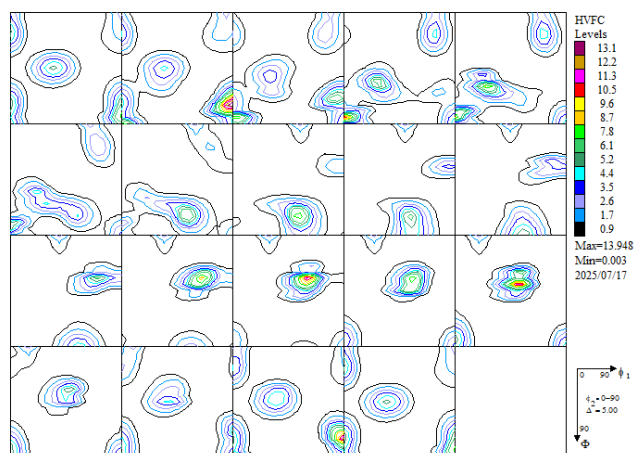
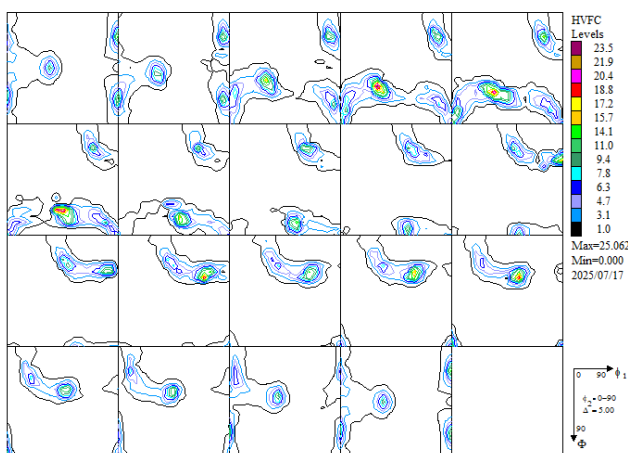
VolumeFraction 計算

Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1 - Distribution :Gauss 13.21	36.7	14.3	14.5	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass
Component No 2 - Distribution :Gauss 27.83	15.4	14.8	16.2	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
Component No 3 - Distribution :Gauss 9.50	12.3	19.5	22.6	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >
Component No 4 - Distribution :Gauss 15.32	19.6	18.1	21.4	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R
Component No 5 - Distribution :Gauss 17.83	12.6	25.8	25.8	{ 0 3 8 } < 1 -8 3 >
Component No 6 - Distribution :Gauss 10.43	31.7	12.1	25.8	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper
Component No 7 - Distribution :Gauss 5.67	5.0	44.5	13.1	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
0.41	Background Volume Fraction			

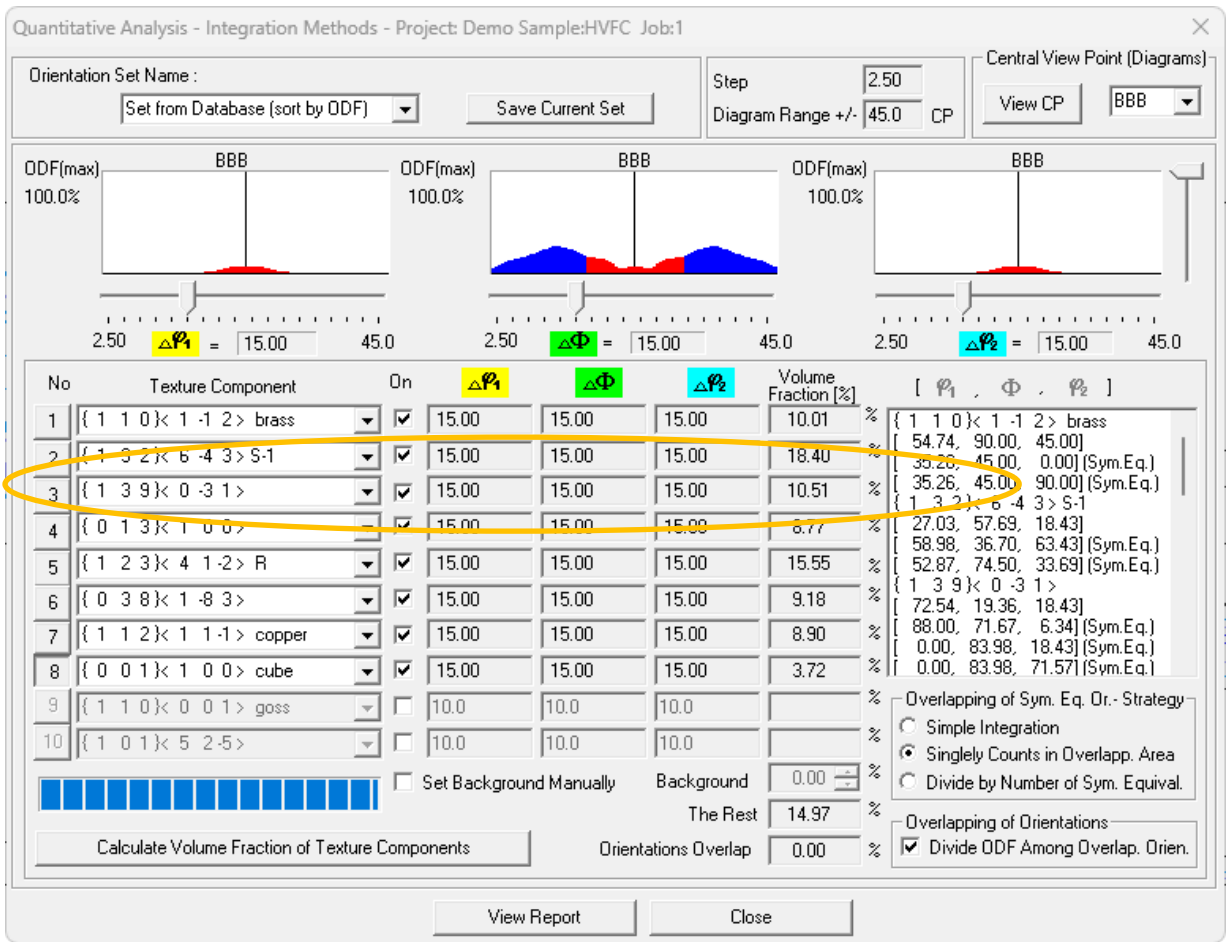
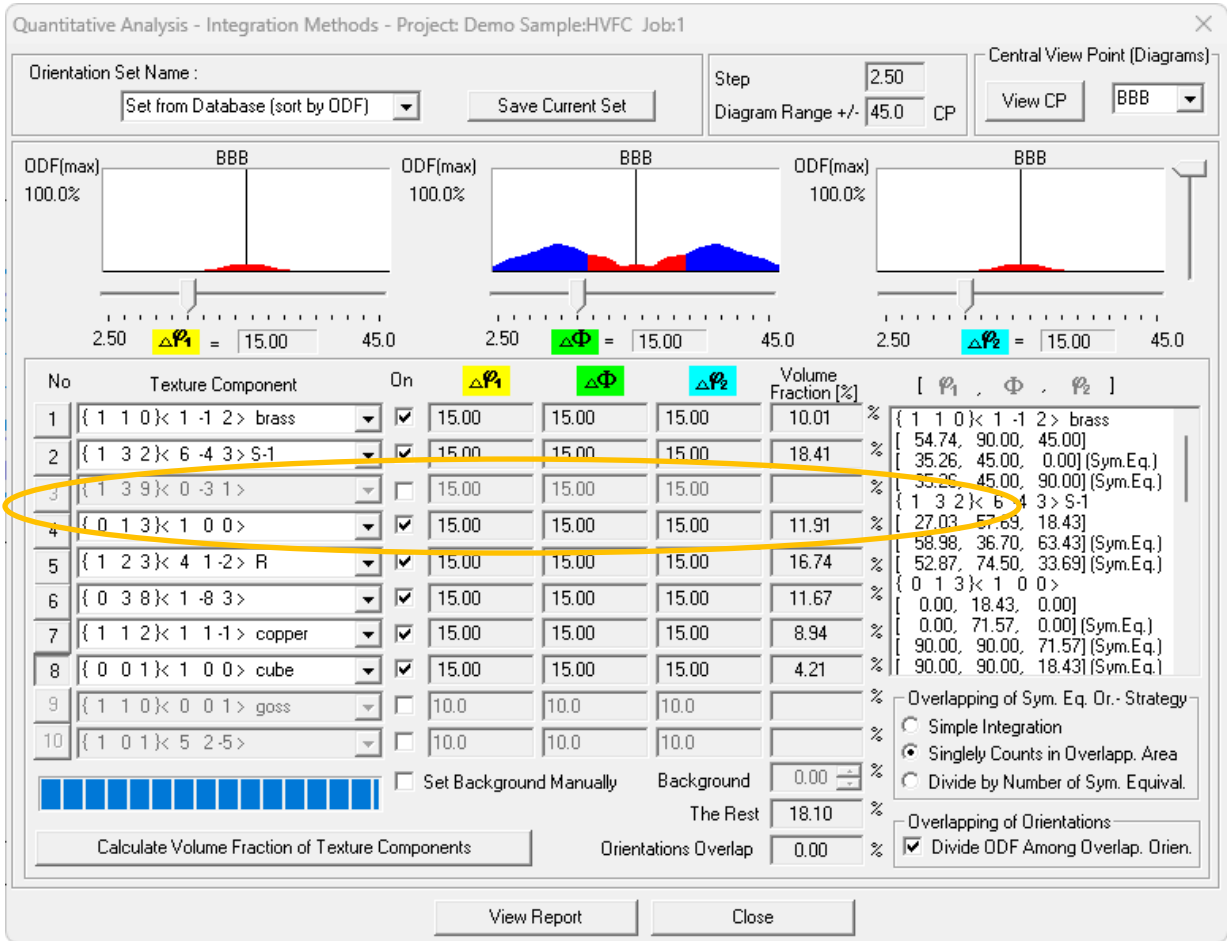


{ 1 3 9 } < 0 - 3 1 >を追加すると他成分に影響を与える

Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1 - Distribution :Gauss 15.06	26.6	17.9	18.0	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass
Component No 2 - Distribution :Gauss 22.14	15.0	13.6	16.6	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
Component No 3 - Distribution :Gauss 18.10	16.9	21.0	19.5	{ 1 3 9 } < 0 -3 1 >
Component No 4 - Distribution :Gauss 10.87	16.3	21.8	21.1	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >
Component No 5 - Distribution :Gauss 14.82	19.1	22.5	21.8	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R
Component No 6 - Distribution :Gauss 7.14	19.5	30.8	22.2	{ 0 3 8 } < 1 -8 3 >
Component No 7 - Distribution :Gauss 8.70	25.7	11.9	24.1	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper
Component No 8 - Distribution :Gauss 2.89	10.2	28.9	16.8	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
0.28	Background Volume Fraction			



しかし、Integration Methodsでは方位の追加でも他成分比に大きな影響はありません。
Integration Methodsでは、FWHMではなく、幅の指定である。



まとめ

方位数	ModelFunctionsMethod		IntegrationMethods	
	7	8	7	8
brass	13.21	15.06	10.01	10.01
S	27.63	22.14	18.41	18.40
{139}<0-31>		18.10		10.51
{013}<100>	9.50	10.87	11.91	8.77
{123}<41-2>R	15.32	14.82	16.74	15.55
{038}<1-83>	17.83	7.14	11.67	9.18
copper	10.43	8.70	8.94	8.90
cube	5.67	2.89	4.21	3.72
Other	0.41	0.28	18.10	14.97
Σ	100	100	99.99	100.01

VolumeFractionを求める際、
ModelFunctions Methodより
Integration Methodsが安定した結果が得られる。
ModelFunctionsMethod では、otherを少なくする傾向がある。

