

結晶方位の定量とODF 3次元表示図

ODF解析結果から結晶方位の強度と体積分率に関してModelを作成して評価してみた。

全ての結晶方位が決まれば、体積分率算出にModeling方法は有効な手段となる。

2008年09月09日

2008年10月15日修正

2008年11月14日修正 (体積分率)

概要

XRDによる極点図からODF (Crystallite Orientation Distribution Function) 解析することで結晶方位が定量的に表現出来ると言われている。その検証を立方晶の体積分率で検証を行う。

前提

立方晶は対称としてEuler空間で ϕ_1 Φ ϕ_2 は $0 \rightarrow 90$ 度とし

結晶方位の広がりをGauss関数の半幅幅で与えるとする。

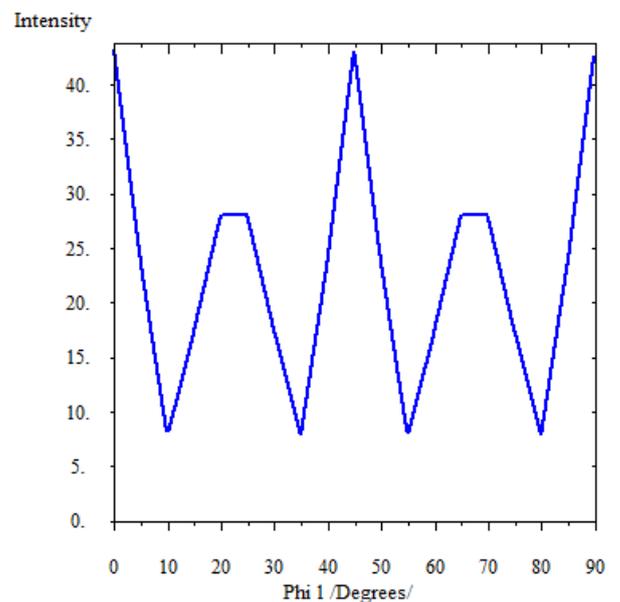
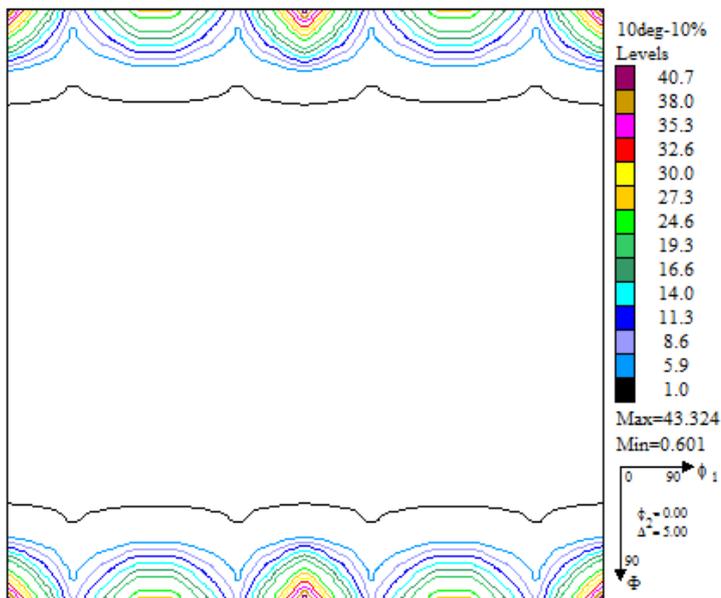
結晶方位は $\{001\}\langle 100 \rangle, \{001\}\langle 3-10 \rangle, \{001\}\langle 2-10 \rangle, \{001\}\langle 1-10 \rangle$ とし、各体積分率を10%

Euler角度位置は以下

	ϕ_1	Φ	ϕ_2
$\{001\}\langle 100 \rangle$	0.00	0.00	0.00
$\{001\}\langle 3-10 \rangle$	18.43	0.00	0.00
$\{001\}\langle 2-10 \rangle$	26.57	0.00	0.00
$\{001\}\langle 1-10 \rangle$	45.00	0.00	0.00

5度の断面で結晶方位の広がりを10degとした場合

$\phi_1: 0 \rightarrow 90$ $\Phi=0.0$, $\phi_2=0.0$



5度断面では $\{001\}\langle 100 \rangle$ と $\{001\}\langle 1-10 \rangle$ が $\{001\}\langle 3-10 \rangle, \{001\}\langle 2-10 \rangle$ より強く表示される。

しかし面積 (体積も) 同じである！！

3次元表示図を見ても、強度では結晶方位体積分率が同じとは判断出来ない。

3次元表示図の強度では体積分率を示さない。

市販されているODFによっては、マウス移動で1度ステップの強度を示すソフトもある。

しかし、体積分率を算出する為には

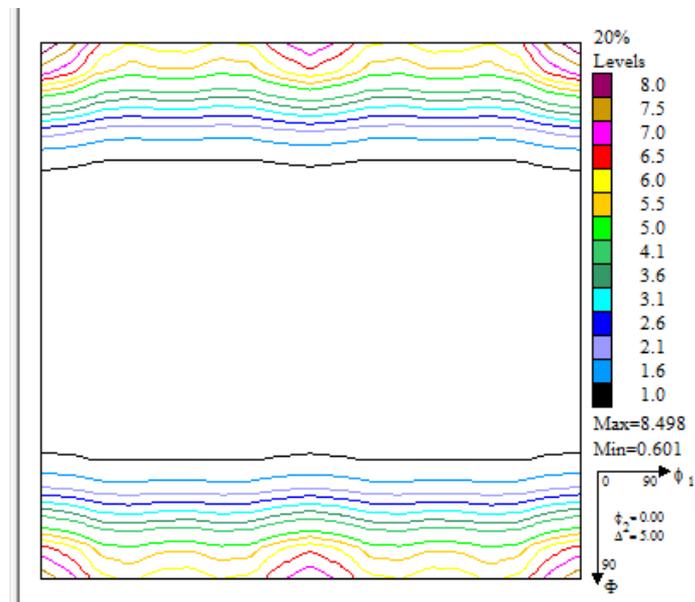
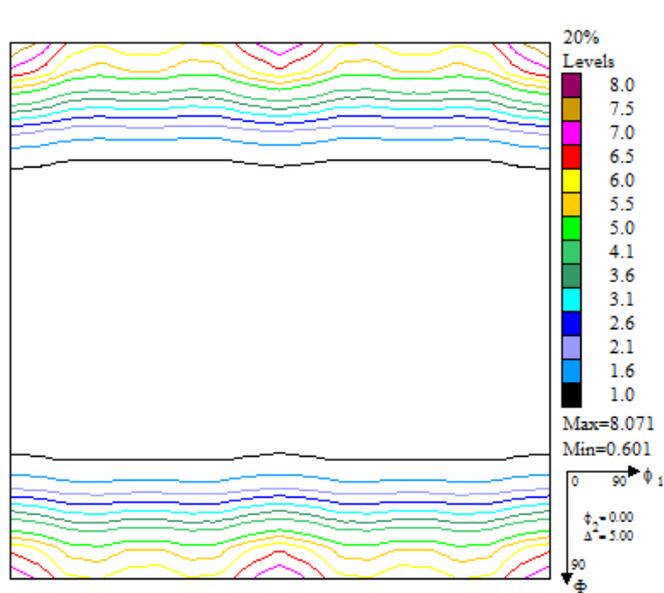
結晶方位に広がりを与えて計算する事になります。

体積分率の定量

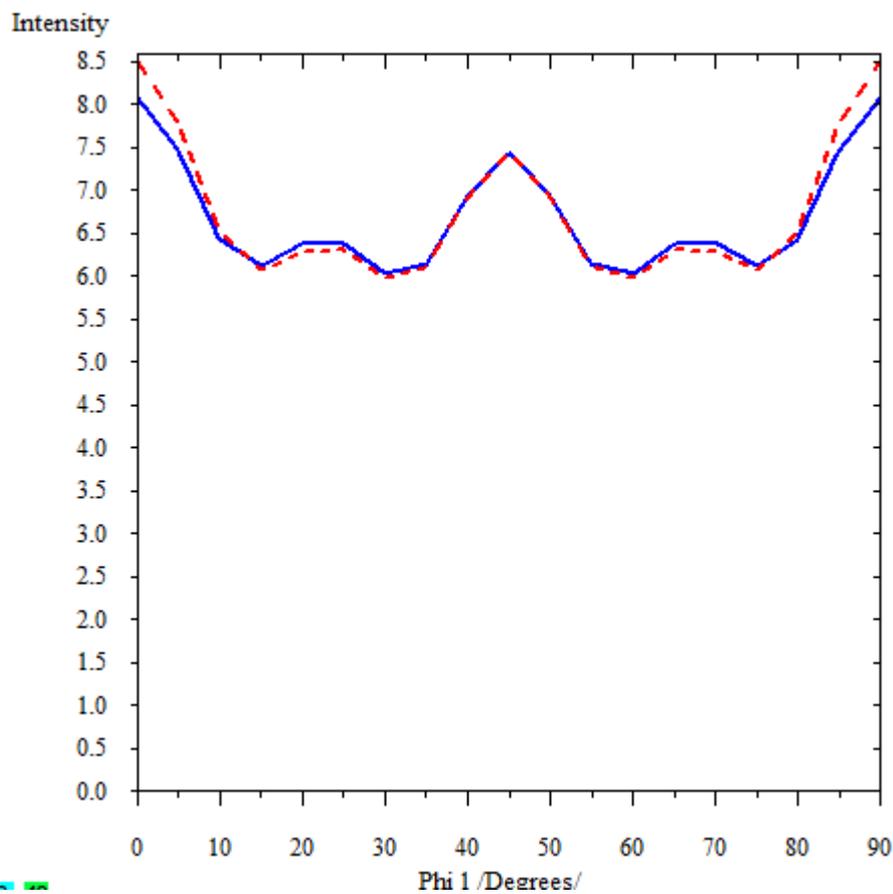
結晶方位は $\{001\}\langle 100\rangle, \{001\}\langle 3\cdot 10\rangle, \{001\}\langle 2\cdot 10\rangle, \{001\}\langle 1\cdot 10\rangle$ とし、各体積分率を10%
結晶方位の広がりをGauss関数の半価幅を10, 15, 20, 25度と変えた場合の
Modelling-Method定量値を比較する。

Euler角度20度の入力データ

Modelling 定量結果から



強度比較



青 : 入力データ

赤 : 定量結果

結果

計算結果	入力	Euler角度半価幅			
		10	15	20	25
{001}<100>	定量値	10%	10%	12%	12%
	φ1幅	10.1	16.1	21.7	24.4
	φ幅	10.0	15.1	20.1	25.3
	φ2幅	10.0	14.2	20.3	24.6
{001}<3-10>	定量値	10%	10%	8%	9%
	φ1幅	9.2	15.5	18.7	22.1
	φ幅	10.0	14.8	19.9	23.1
	φ2幅	10.0	14.6	20.1	25.4
{001}<2-10>	定量値	10%	10%	11%	8%
	φ1幅	9.4	15.3	19.6	22.9
	φ幅	10.0	15.2	20.2	27.5
	φ2幅	10.2	14.5	20.1	23.8
{001}<1-10>	定量値	10%	10%	10%	11%
	φ1幅	10.4	16.4	19.9	25.7
	φ幅	10.0	14.9	20.0	25.3
	φ2幅	10.0	14.6	20.0	24.6

実際のデータではEuler角度幅の違い、結晶方位の近接等で上記結果とは異なるが全ての結晶方位が決まれば、Modeling-Methodの結晶方位体積分率計算が可能と思われる。