

# 集合組織

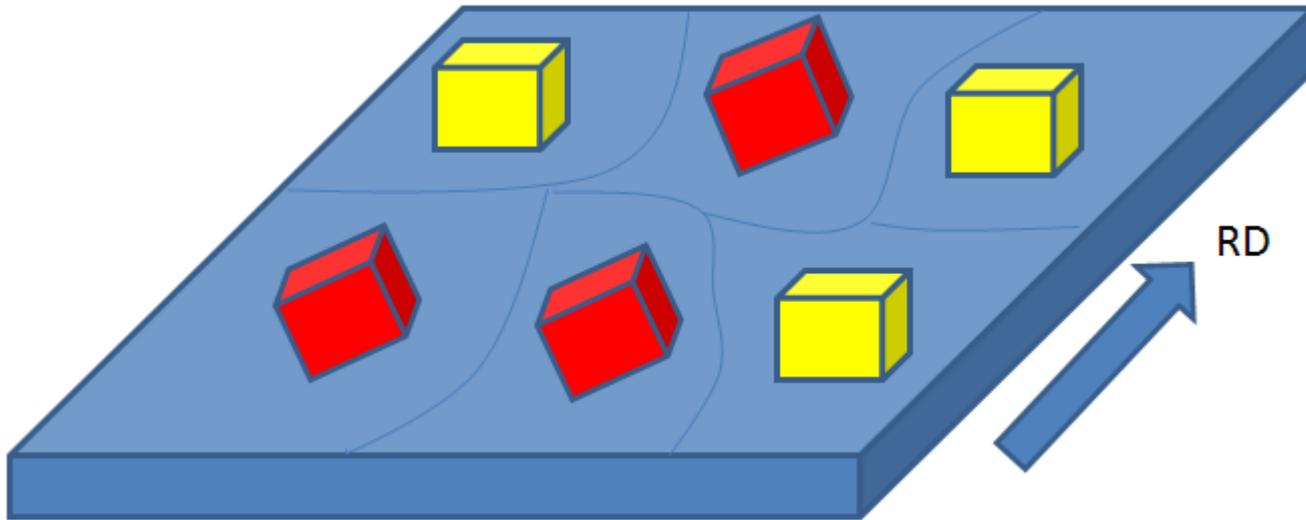
結晶方位{hkl}<uvw>の決定方法

2013年08月08日

*HelperTex Office*  
*odftex@ybb.ne.jp*

# 圧延板の結晶方位

$\{hkl\} \langle uvw \rangle$  と表現  
板面  $\{hkl\}$ 、圧延方向  $\langle uvw \rangle$  方向



# 集合組織の表現

## 正極点図

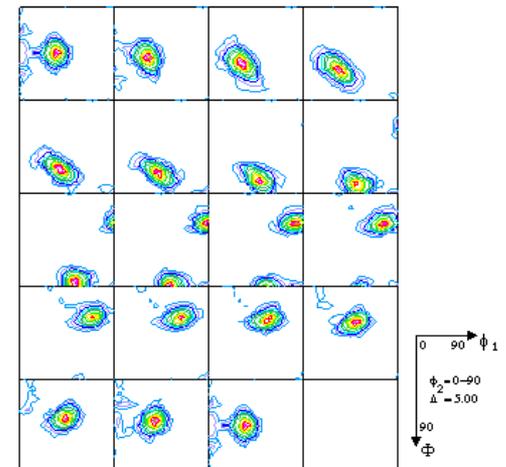
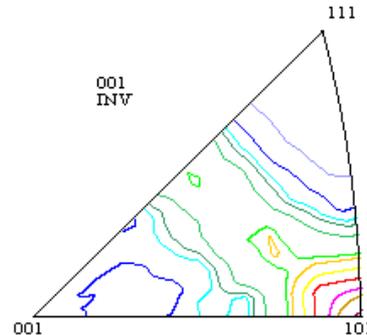
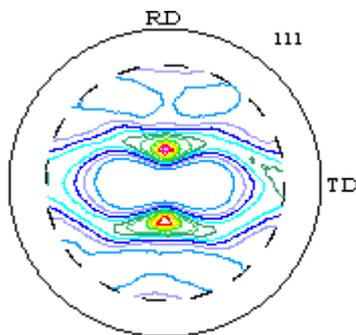
材料座標系を基準で結晶方位の分布を表現  
 $\{hkl\}\langle uvw \rangle$

## 逆極点図

結晶座標系を基準で材料方位の分布を表現  
 $\langle uvw \rangle$

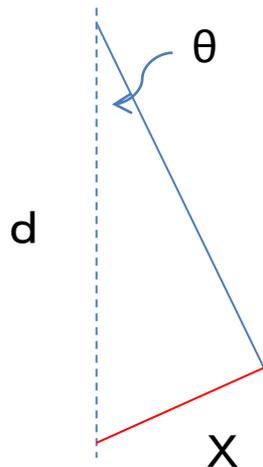
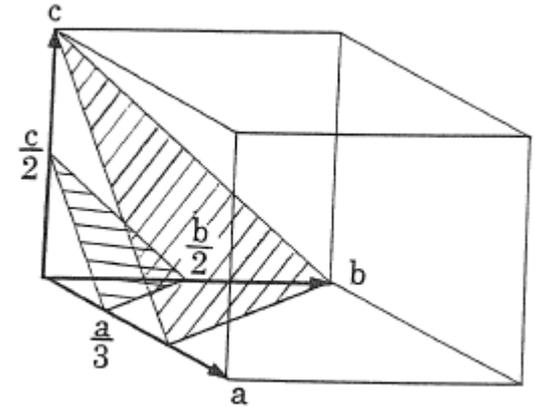
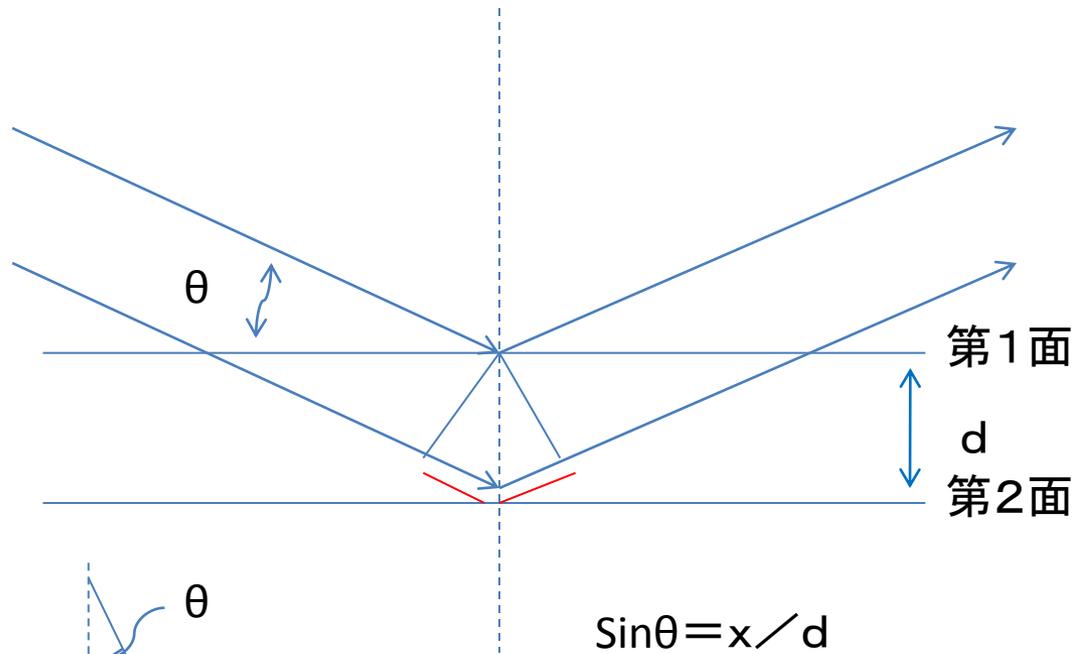
## ODF

結晶方位の分布  
 $\{hkl\}\langle uvw \rangle$



# 回折

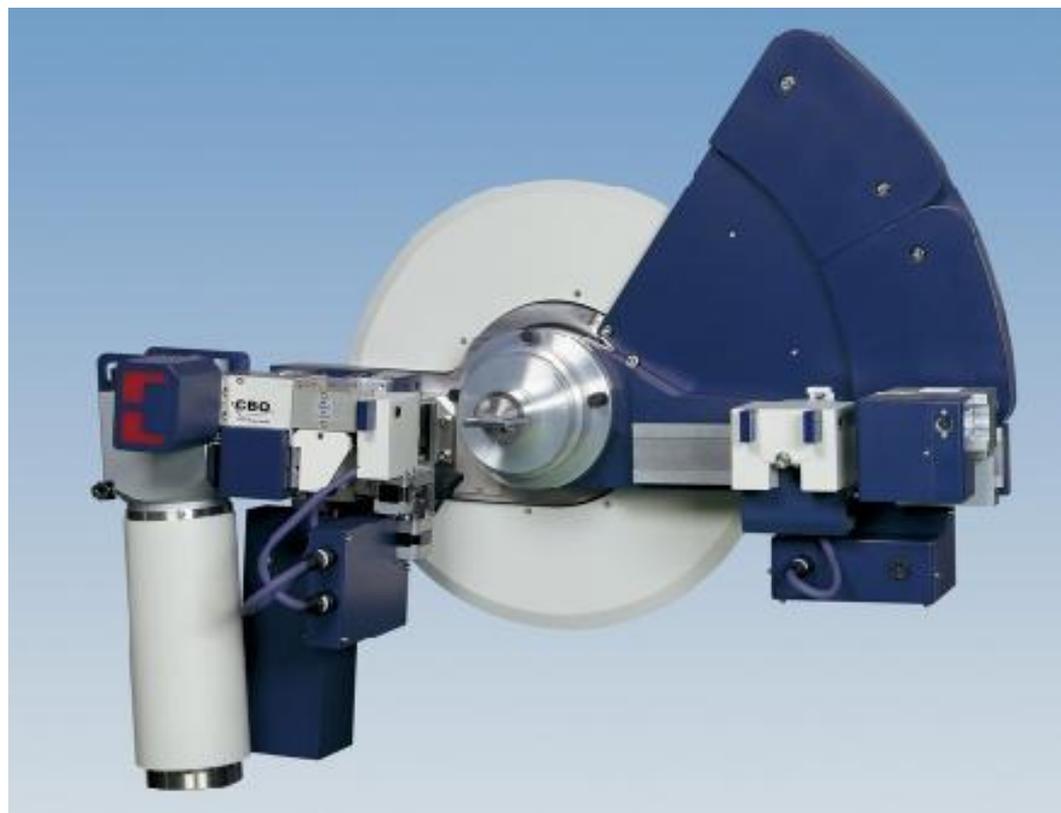
結晶面を考える X線は特性X線で波長を $\lambda$ とすると 干渉はブラッグの公式  $2d\sin\theta = n\lambda$  で発生する。

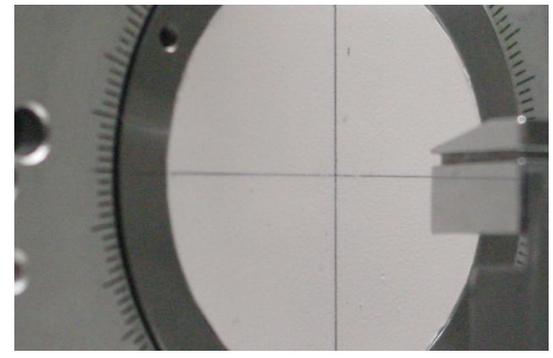
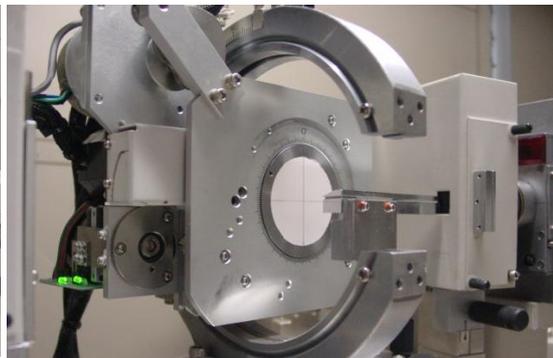
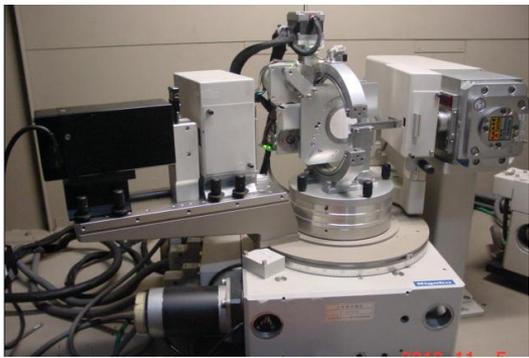


$$\sin\theta = x/d$$

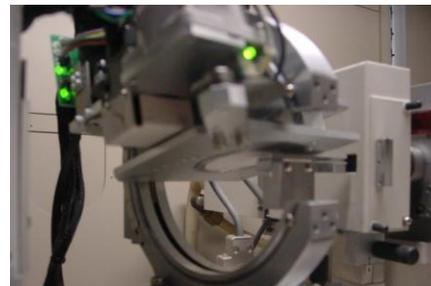
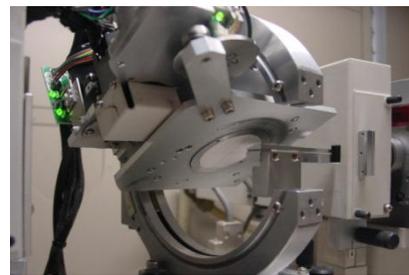
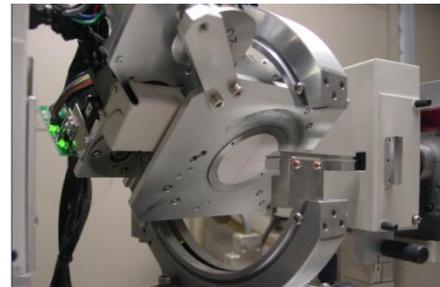
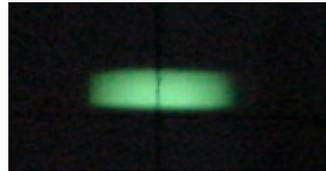
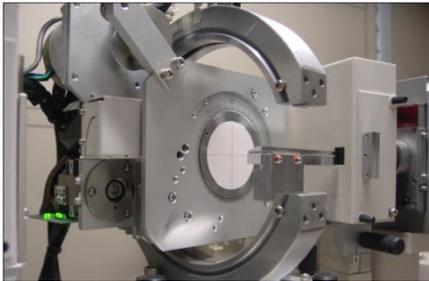
2倍の $d\sin\theta$ が波長と一致するとき

# 極点図の測定



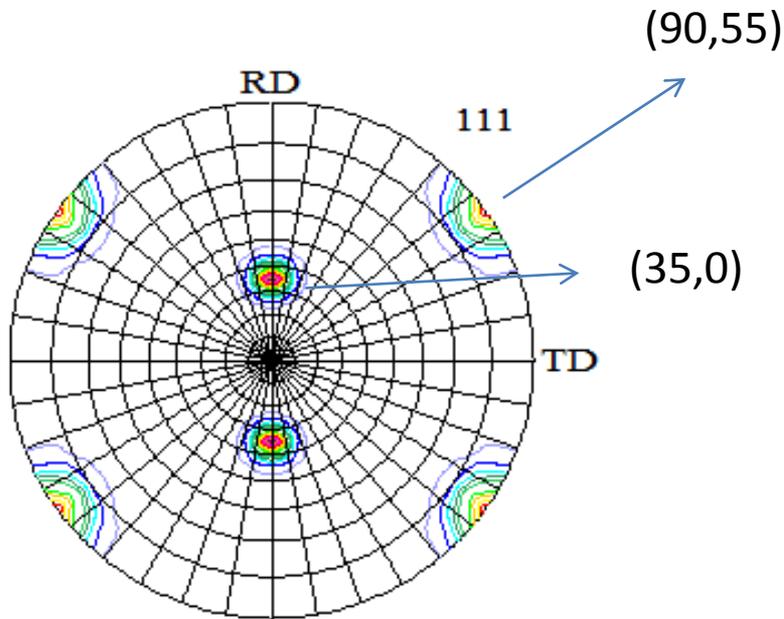


DS=1/2deg、入射角度19.0degにおける試料位置のX線照射エリア

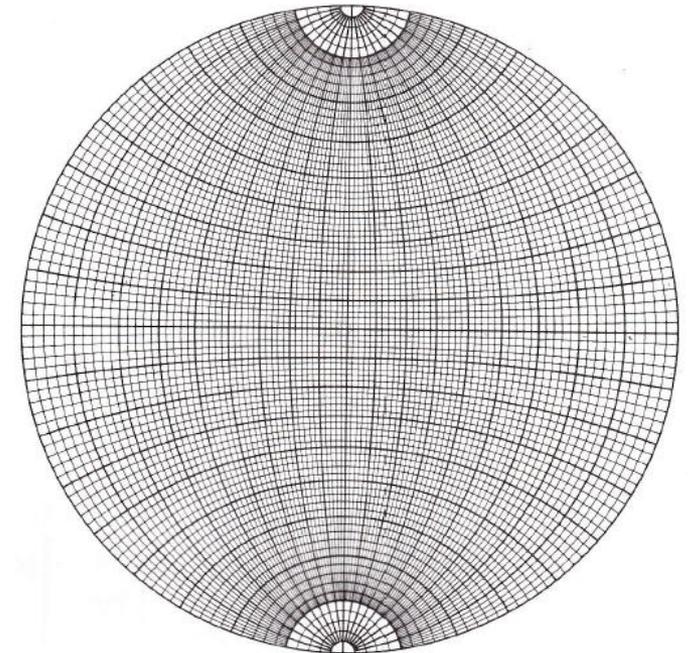




# 極点図から結晶方位の決定(1)



Wulff net



Wulff netでは、RDからの角度が読める

各極に対し、ND,RDからの角度を調べて{hkl} <uvw>を決定する。

{hkl}は、NDから90, 35度の面は？

<uvw>は、RDから55度の面は？

面間隔  $d_1$  の面  $(h_1 k_1 l_1)$  と、面間隔  $d_2$  の面  $(h_2 k_2 l_2)$  との間の角  $\phi$  は、つぎの式から求めら

( $V$  は単格格子の体積)。

$$\text{立方: } \cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

$$\text{正方: } \cos \phi = \frac{\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2}{a^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2}}{\sqrt{\left(\frac{h_1^2 + k_1^2}{a^2} + \frac{l_1^2}{c^2}\right)\left(\frac{h_2^2 + k_2^2}{a^2} + \frac{l_2^2}{c^2}\right)}}$$

$$\text{斜方: } \cos \phi = \frac{\frac{h_1 h_2}{a^2} + \frac{k_1 k_2}{b^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2}}{\sqrt{\left(\frac{h_1^2}{a^2} + \frac{k_1^2}{b^2} + \frac{l_1^2}{c^2}\right)\left(\frac{h_2^2}{a^2} + \frac{k_2^2}{b^2} + \frac{l_2^2}{c^2}\right)}}$$

$$\text{菱面: } \cos \phi = \frac{a^4 d_1 d_2}{V^2} \left[ \sin^2 \alpha (h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2) + (\cos^2 \alpha - \cos \alpha) (k_1 l_2 + k_2 l_1 + l_1 h_2 + l_2 h_1 + h_1 k_2 + h_2 k_1) \right]$$

$$\text{六方: } \cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + \frac{1}{2}(h_1 k_2 + h_2 k_1) + \frac{3a^2}{4c^2} l_1 l_2}{\sqrt{\left(h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1 + \frac{3a^2}{4c^2} l_1^2\right)\left(h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2 + \frac{3a^2}{4c^2} l_2^2\right)}}$$

$$\text{単斜: } \cos \phi = \frac{d_1 d_2}{\sin^2 \beta} \left[ \frac{h_1 h_2}{a^2} + \frac{k_1 k_2 \sin^2 \beta}{b^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2} - \frac{(l_1 h_2 + l_2 h_1) \cos \beta}{ac} \right]$$

$$\text{三斜: } \cos \phi = \frac{d_1 d_2}{V^2} [S_{11} h_1 h_2 + S_{22} k_1 k_2 + S_{33} l_1 l_2 + S_{23} (k_1 l_2 + k_2 l_1) + S_{13} (l_1 h_2 + l_2 h_1) + S_{12} (h_1 k_2 + h_2 k_1)]$$

$(h_2 k_2 l_2)$	$(h_1 k_1 l_1)$						
	100	110	111	210	211	221	310
100	0 90						
110	45 90	0 60 90					
111	54.7	35.3 90	0 70.5 109.5				
210	26.6 63.4 90	18.4 50.8 71.6	39.2 75.0	0 36.9 53.1			
211	35.3 65.9	30. 54.7 73.2 90	19.5 61.9 90	24.1 43.1 56.8	0 33.6 48.2		
221	48.2 70.5	19.5 45 76.4 90	15.8 54.7 78.9	26.6 41.8 53.4	17.7 35.3 47.1	0 27.3 39.0	
310	18.4 71.6 90	26.6 47.9 63.4 77.1	43.1 68.6	8.1 58.1 45	25.4 49.8 58.9	32.5 42.5 58.2	0 25.9 36.9
311	25.2 72.5	31.5 64.8 90	29.5 58.5 80.0	19.3 47.6 66.1	10.0 42.4 60.5	25.2 45.3 59.8	17.6 40.3 55.1
320	33.7 56.3 90	11.3 54.0 66.9	36.9 80.8	7.1 29.8 41.9	25.2 37.6 55.6	22.4 42.3 49.7	15.3 37.9 52.1
321	36.7 57.7 74.5	19.1 40.9 55.5	22.2 51.9 72.0 90	17.0 33.2 53.3	10.9 29.2 40.2	11.5 27.0 36.7	21.6 32.3 40.5
331	46.5	13.1	22.0				
510	11.4						
511	15.6						
711	11.3						

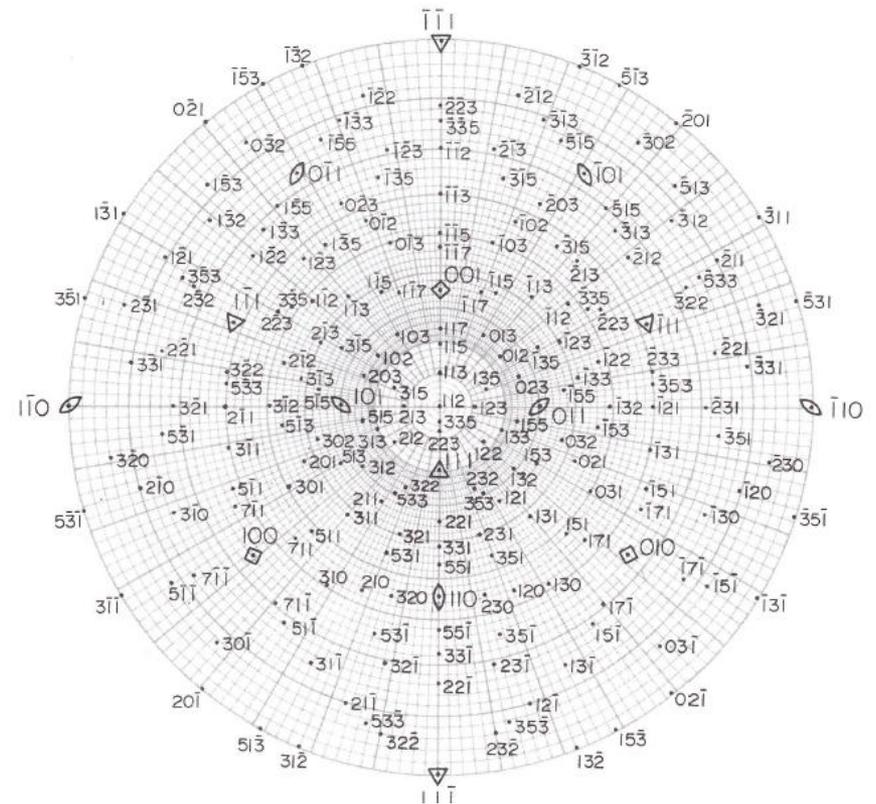
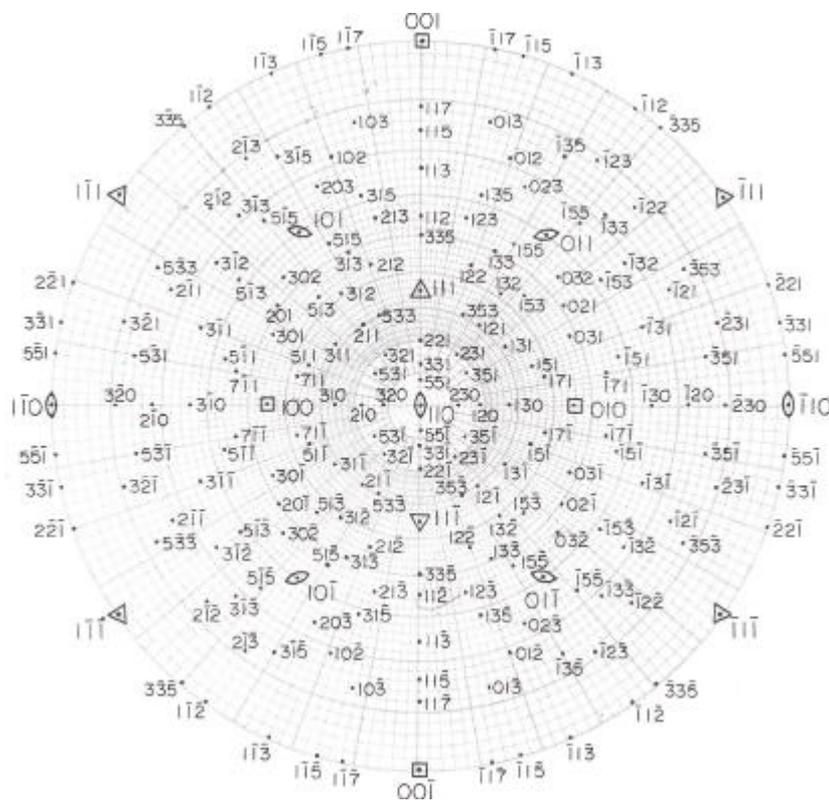
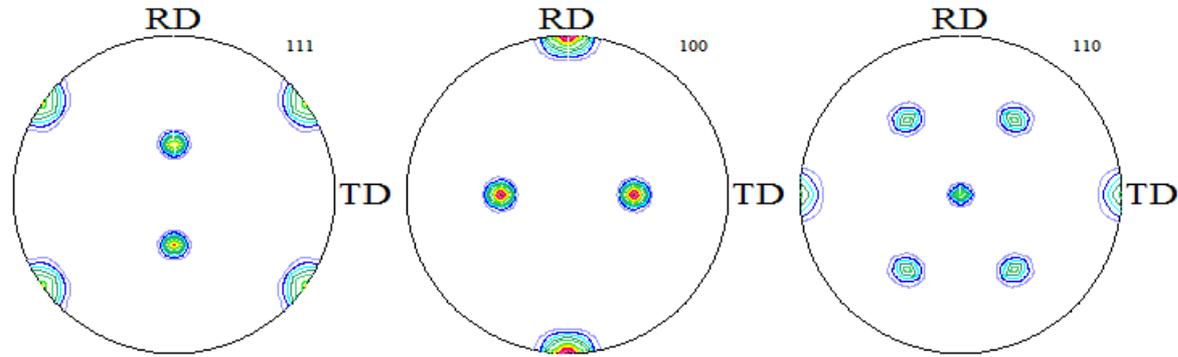
ほとんどの数値は、R. M. Bozorth; Phys. Rev. 26, 390 (1925) より引用した。

# {hkl}<uvw>の決定

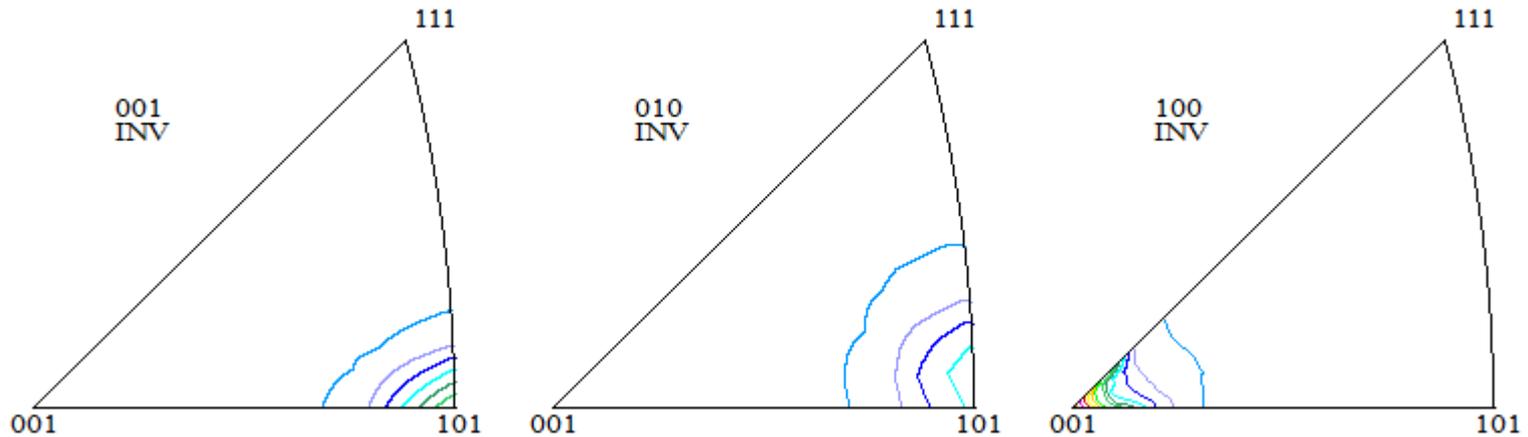
$(h_2 k_2 l_2)$	100	110
100	0 90	
110	45 90	0 60 90
111	54.7	35.3 90

{111}極点図で、NDから90, 35度は{110}で、RDから55度は<100>である。よって、結晶方位は{110}<001>である。

# 極点図から結晶方位の決定(2)



# 逆極点図から結晶方位の決定(3)

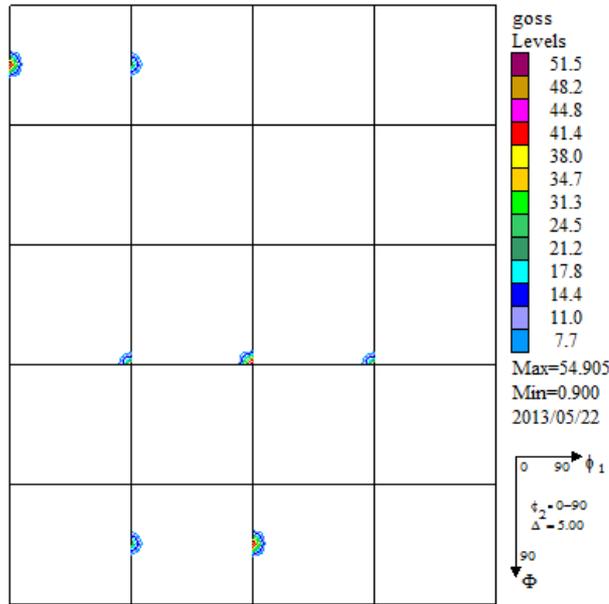


001INVはND、100INVはRDを表しています。

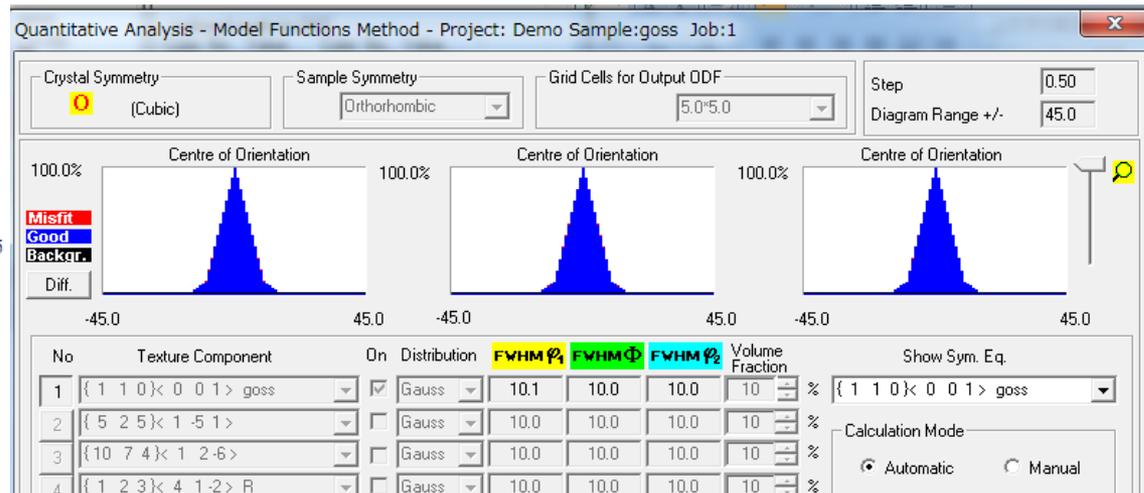
ND方向は、 $\langle 101 \rangle$ 方向に分布し、RD方向は $\langle 001 \rangle$ 方向に分布が強い

立方晶は、 $\langle 101 \rangle$ は、 $\{101\}$ と同じなので、 $\{110\}\langle 001 \rangle$ であることが分かります。

# ODFによる結晶方位の決定(4)



## VolumeFraction決定



同時に複数の結晶方位VolumeFractionが決定できる。

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\Phi$	FWHM $\phi_2$	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.1	10.0	10.0	10 %

# Euler角度と{hkl}<uvw>の関係(cubic)

$$h = n \sin \Phi \sin \varphi_2$$

$$k = n \sin \Phi \cos \varphi_2$$

$$l = n \cos \Phi$$

$$u = n' (\cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi)$$

$$v = n' (-\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi)$$

$$w = n' \sin \varphi_1 \sin \Phi$$

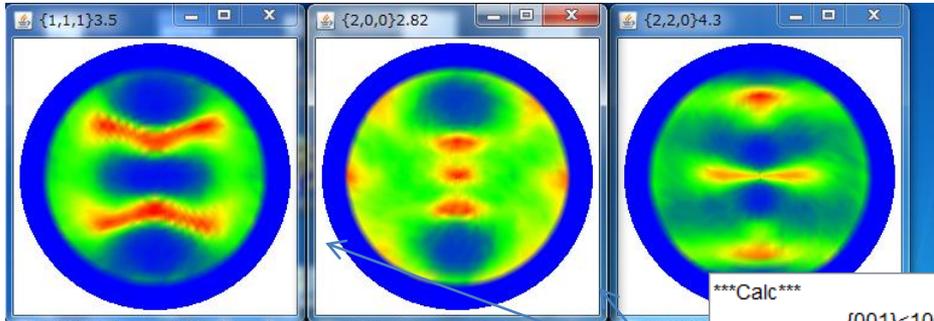
$$\Phi = \arccos \frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$\varphi_2 = \arccos \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}} = \arcsin \frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2}}$$

$$\varphi_1 = \arcsin \left[ \frac{w}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}} \cdot \sqrt{\frac{h^2 + k^2 + l^2}{h^2 + k^2}} \right]$$

# 複数の極点図からPoleHKLUVWSearchソフトウェアで

入力極点図



Autohkluvw

Minimum level

PoleHKLUVWsearch 2.02XT[14/03/31] by CTR

File Help Simulation

Material select: Cubic

TXT2(\*2.TXT\*.TXT) files select: Holder D:\tmp\NO010\ASC

FileName: 111-NO010\_chB0DS\_2.TXT 200-NO010\_chB0DS\_2.TXT 220-NO010\_chB0DS\_2.TXT

{HKL}: {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0}

Manualhkluvw

PeakSearch

Peak search: Peaksearch minimum level  Same peak scope(degree)

Exclude:  astart angle(!=0.0) Minimum level

Search

HKLUVWSearch

Limit Distance  Manual HKLUVW

Autohkluvw

Minimum level  Auto HKLUVW

```
***Calc***
{001}<100> {013}<100> {110}<1-11> {110}<1-12> {111}<01-1> {112}<11-1> {122}<2-21> {132}<6-43>
1,1,1 1.0 1.0 0.25 1.0 0.14 1.0 0.5 0.8
1,0,0 1.0 1.0 0.25 1.0 0.33 1.0 0.66 1.0
1,1,0 1.0 1.0 1.0 0.42 0.33 1.0 0.5 0.75
***Result***
{001}<100> {013}<100> {112}<11-1>
1,1,1 1.0 1.0 1.0
1,0,0 1.0 1.0 1.0
1,1,0 1.0 1.0 1.0
```

検索された方位の合成極点図

