# HCP材料配向評価のためのTools

2015年12月28日 *HelperTex Office* 

Version 管理¥DATA¥HCP

材料評価として極点図を使った異方性評価は古くから行われています。

評価法としては、

無配向試料(ICDD)との強度比による逆極点評価

- Lotgering評価
- 完全極点図による配向関数評価
- 反射極点図による配向関数評価
- ODF 解析をサポートするソフトウエア
- ODF解析によるVolumeFraction定量
- ODF解析による配向関数評価
- ODF解析による逆極点評価

などが考えられます。

CTRパッケージソフトウエアではこのような評価を行うためODF解析を除くソフトウエアを 揃えています。

#### 目次

- 1. 無配向試料(ICDD)との強度比による逆極点評価
- 2. Lotgering法による配向評価
- 3. 完全極点図による配向関数評価
- 4. 反射極点図による配向関数評価
- 5. ODF 解析をサポートするソフトウエア
  - 5.1 測定メーカ各社データを CTR ソフトウエアで解析を可能にするソフトウエア
  - 5. 2 3指数<->4指数変換
  - 5.3 結晶方位図描画
  - 5. 4 逆極点のDirection<->Plane変換
  - 5.5 各社 ODF 解析の ODF 図から結晶方位位置の決定
  - 5. 6 各社 ODF 解析の逆極点図からND, TD, RDの方位を Plane、Direction で描画
  - 5.7 各社 ODF 解析の再計算極点図を TXT2 ファイルに変換
  - 5.8 ODF 入力極点図のError評価を行う ValueODFVF
- 6. ODF解析によるVolumeFraction定量
- 7. ODF解析による配向関数評価
- 8. ODF解析による逆極点評価

本説明に使用しているソフトウエアを含む全てのCTRパッケージトウエアを一定期間評価して頂く 事が可能です。HelerTexサイトからご請求下さい。

CTRフルパッケージソフトウエア、説明書、技術資料を提供致します。

- 1. 無配向試料(ICDD)との強度比による逆極点評価
  - INPUTデータ:2θ/θscanによる連続測定データ



#### 処理

連続データから指数毎の分割データに変換し、標準強度データとの強度比を作成し 逆極点図を描画する。求められる情報は、試料面方向の方位分布(Plane)である。 複数データの同時処理が可能

## 使用する CTR ソフトウエア

# $Marerial Data,\ Profile to Division Profile, Inverse All, Inverse Display Hexa$

M ProfiletoDivisionProfile 1.06YT[16/06/30] by CTR	
File Help	
Material List	
Full Profiles(ASC) or Division profiles(ASC)         Files       C:\CTR\DATA\HCP\Profile-Inverse	Select files number =1
Smoothing Data scope condition for division deg.	Treate( NEWFILE)
	InverseAll

#### 分割指数付けされたプロファイル



InverseAll で標準データとの強度比を計算

M Inverse All 1.08YT[16/06/30] by CTR	
File ProfiletoDivisionProfile Condition initialize Help	
ICDD Inverse	erial List
RandomSelect(division ASC)	Disp
Data select(ASO) Dir C#CTR¥DATA¥HCP¥Profile-Inverse¥NEWFILE Files	Asc files number 1 List Previous Next SelectFile C:\CTR\DATA\HCP\Profile-Inverse\NEWFILE\JIS-Ti-A.ASC DISP
Smoothing points 3	Standardization © Execution Calc Disp
File         Help           ICDDmode         Standardization         BGsmpoints=3 PEAK           (100)         (002)         (101)         (102)           JIS-TI-A         0.678         3.075         0.642         0.691	(110) (103) (200) (112) (201) 0.564 1.149 0.087 0.735 0.083
強度比から逆極点凶の描画 <i>result.txt_JIS-Ti-A_Max=3.08</i>	[1]; 200 p. 58
(0002)3.08 (10-13)1.15 (10-12)0.69 (10-11)	(10-84 120 2110-05 (10-10)0.33
[0001]	[10-10]

材料と結晶の関係









材料表面法線方向	(ND) と
結晶面 10-13}が直行	テしています。

2. Lotgering法による配向評価

INPUTデータ:2θ/θ s c a n による連続測定データ <sup>1000</sup> <sup>2000</sup> <sup>2000</sup> <sup>1000</sup> <sup></sup>

評価法

前記逆極点との違いは、無配向試料なしに、測定されているすべての面方位の強度との比較を行う。 前記逆極点では無配向材では全て1.0であるが、Lotgering法では0.0である。 複数データの同時処理が可能。

使用する CTR ソフトウエア

# MarerialData, Lotgering

Lotgering ソフトウエアで連続データを読み込む



#### Peak計算を行う。



計算結果が表示されます。

## 3. 完全極点図による配向関数評価

INPUTデータ: {002} 透過極点図と {002} 反射極点図



評価法

透過極点図のバックグランド、吸収補正、反射極点図のバックグランド、defocus補正を行い 透過反射極点図の接続からND,TD,RD方向への偏りを数値化する。

使用する CTR ソフトウエア

ODFPoleFigure1.5、PFConnection、Orientation

バックグランド、吸収、defocus 補正を個別に行う。

P ODFPolefigure1.5 1.19T[16/06/30] by CTR
File Linear Toolkit Help InitSet Revik
Files select ASC(RINT-PC)  002.jet ASC
Celtration Condition Previous Next CWOTRWDATAWHOP4completePoleFigure=TW002_ref.ASC
-Backgroud delete mode DoubleMode SingleMode LowMode HighMode Nothing Set Disp 00 Interporation V Full
r AbsCalc Schulz reflection method ▲ Absorption coefficien 1.0 1/cm Thickness 1.0 cm 2Theta 0.0 dec. ⊙1/kt Profile
Cletous file Select     TextDisp @1/Ra Profile Limit Alfa Defocus val. Free V
StandardeeOutFiles StandardeeOutFiles Asc O Ras O TXT2 O TXT Search minimum RpXIOubic only) ValueODF-B ValueODF-A Cancel Calc ODF File

透過反射データの接続

FFConnection 1.09YT[16/06/30] by CTR			×
File Help ConnectionMode			
Files(TXT2) select Files(TXT2) select Path C:\CTR\DATA\HCP\completePoleFigure-TI			
NO1 Filename 002-trans_2.TXT		0.0 35.0 Low->Zero	
N02 Filename 002-ref_2.TXT		15.0 90.0 Low->Zero	
Connection territory data			
NOT	NO2/No1 Ratio	1.0 Check Change	
Connect			

接続した完全極点図が得られる。



得られた完全極点図から配向関数の計算











## 4. 反射極点図による配向関数評価

透過極点図を得るためには、試料を薄くしなくてはなりません。厚い試料をそのまま評価するとなると 反射極点を用います。この評価法は、配向が底面に集中している場合です。

INPUTデータ: {002} 反射極点図



## 評価法

{002} 極点図の中心付近に極密度が集中し、他に極が存在しない場合、defocus補正の 必要としない領域の測定を行い、バックグランドのみ削除する。

測定されていない領域は指数関数でFittingを行い、完全極点図を作成し配向関数評価を行う。 使用する CTR ソフトウエア

# ODFPoleFigure2(1\_5),NDOrientation,

ODFPoleFigure でバックグランドを削除し、TXT2 ファイルを作成

NDOrientation ソフトウエアで TXT2 を読み込む

🕌 NDOrientation 1.04X by CTR	
File Help	
InputPoleFigureFile[TXT2 (alfa, beta, Intensity)]         C*CTR*DATA*HCP*RefrectionPoleFigure-Mg*002-2.txt         Fitting scope (Exp)         Image: Transformed start         Image: Transformed star	Orientation

α角度25-35のデータを用いて測定されていない領域を外挿し、配向関数を計算

#### Orientation 評価も可能



- 5. ODF 解析をサポートするソフトウエア
  - 5.1 測定メーカ各社データを CTR ソフトウエアで解析を可能にするソフトウエア

MeasureDatatoASC 1.06X	by CTR		
File Help			
SmartLab measure data Ras Format Data(N)	RasPFtoASC	ASC Format Data	Rigaku-SmartLab
Bruker data Uxd Format Data(N)	UxdtoASC	ASC Format Data	Bruker 極点
RINT Inplane ,other data Asc Format Data(N)	PluralAsctoAsc	ASC Format Data	
PANalytical pole figure data TXT,xdrml Data(N)	PANatoAsc	ASC Format Data	PANa 極点
-FullPoleFigure Asc Format(Trans-Ref)	PFTRSeparate	TransPF,ReflectPF ASC data	
βsmAsc Asc Format (N)	PoleFigureAsctoSMAsc	ASC Format Data	
-PANalytical data CSV format (N)	PANaCSVtoASC	ASC Format Data	PANa 極点
RigakuOldData Asc format(N)	Rad2050HpFilter	ASC Format Data	
PANalytical T/T data xrdml Data(N)	PANaTTDatatoAsc	ASC Format Data	PANa 連続データ

# 5.2 3指数<->4指数変換

六方晶の方位解析では、3指数で測定を行い、解析結果は、3指数、或いは4指数で表現されます。 3指数、4指数、Euler角度入力から3指数、4指数、Euler角度に変換を行い、 結晶方位図を描画します。下図は3指数から変換しています。

▲ HexaConvert 1.09YT[16/06/30] by CTR	
File Step Help	
A ♥ X-Axis[100] ([2-1-10])	
Miller Notation (3Axis Notation) 1 1 1 1 1 1 1 hkl	uvw
Miller Bravais Notation(4 Axis Notation)	UVXW
Euler (p1 Fp2) 0.0 72.512 30.0	
r Material select	
Titanium.TXT	
c/a 1.587 ψ2 0 ∨ Calc	
DISP	
Position 10 V Disp size 200 V DISP	
OK Return Structure	

結晶方位図



## 5.3 結晶方位図描画

Miller Indices

BG Corr.

20

White

~

DISP Position

CubicからTriclinicまで結晶方位図を描画します。 以下はHCPで表示する材料を選択し 3指数で入力します。

CrientationDisplay 1.10YT[16/06/30] by CTR	
File Help	
Material Material select Titanium Hexagonal : 1.0 x 1.0 x 1.5871 x 90.0 x 90.0 x 120.0 Option A-Type	

O a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 Y 90

~

~

DISP

Minus

5. 4 逆極点のDirection<->Plane変換

500

2.0

(hkl)[uvw] 1 • 1 • 1 • 1 • -2 •

Disp size

Line size

逆極点図は、ND, TD, RD方向への方位分布です。立方晶では、Plane と Direction は一致するが 六方晶では、一致しない部分があります。このため、LaboTex では Plane、TexTools では Direction が 採用されています。この相互変換の数値計算を行っています。

File Help	
Max index 15	Plane 逆極点位置(45.47,43.9)から
Method Plane	Plane(62-813)Direction(31-44)を計算して
Material Titanium.txt	います
φ 45.47 β 43.9 Calc	V. ~ 9 °
45.47 43.9> (6 2 13 )> (6 2 -8 13)	
h 6 k 2 l 13 Calc	
n 6 k 2 t -8 l 13 Calc	
Direction Maxindex 15 $4547439 \rightarrow 17541$	
45 47 43 9> [3 1 -4 4]	
M InverseDirection 1.10 by CTR	
File Help	
File Help Max index 15	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から
File Help Max index 15 Method Direction	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から Direction(31-44)、Plane(66-813)を計算してい
File Help Max index 15 Method Direction Material Titanium.txt	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から Direction(31-44)、Plane(66-813)を計算してい ます
File     Help       Max index     15       Method     Direction       Material     Titanium.txt       φ     45.47     β     43.9	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から Direction(31-44)、Plane(66-813)を計算してい ます。
File       Help         Max index       15         Method       Direction         Material       Titanium.txt         φ       45.47       β       43.9         45.47       43.9       Calc         45.47       43.9       Calc	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から Direction(31-44)、Plane(66-813)を計算してい ます。
File       Help         Max index       15         Method       Direction         Material       Titanium.txt         φ       45.47       β       43.9         45.47       43.9       Calc         45.47       43.9       Calc         Direction       V       5       m	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から Direction(31-44)、Plane(66-813)を計算してい ます。
File Help Max index 15 Method Direction $\checkmark$ Material Titanium.txt $\varphi$ 45.47 $\beta$ 43.9 Calc 45.47 43.9> [7 5 4]> [3 1 -4 4] Direction u 7 $\vee$ 5 w 4 Calc	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から Direction(31-44)、Plane(66-813)を計算してい ます。
File       Help         Max index       15         Method       Direction         Material       Titanium.bxt $\phi$ 45.47 $\beta$ 45.47       43.9       Calc         45.47       43.9       Calc         Direction       u       7       v       5       w       4       Calc         u       7       v       5       w       4       Calc       u       3       v       1       t       -4       w       4       Calc       0	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から Direction(31-44)、Plane(66-813)を計算してい ます。
File Help Max index 15 Method Direction $\checkmark$ Material Titanium.txt $\varphi$ 45.47 $\beta$ 43.9 Calc 45.47 43.9> [7 5 4]> [3 1 -4 4] Direction u 7 $\lor$ 5 w 4 Calc u 3 $\lor$ 1 t -4 w 4 Calc Plane Max index 15 45.47 43.9> (6 2.13)	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から Direction(31-44)、Plane(66-813)を計算してい ます。
File Help Max index 15 Method Direction $\checkmark$ Material Titanium.txt $\varphi$ 45.47 $\beta$ 43.9 Calc 45.47 43.9> [7 5 4]> [3 1 -4 4] Direction u 7 $\checkmark$ 5 w 4 Calc u 3 $\checkmark$ 1 t -4 w 4 Calc Plane Max index 15 45.47 43.9> (6 2 13) 45.47 43.9> (6 2 -8 13)	Direction 逆極点位置(45.47,43.9)から Direction(31-44)、Plane(66-813)を計算してい ます。

5.5 各社 ODF 解析の ODF 図から結晶方位位置の決定

ODF の X 軸切り替えは、入力時に変更

ODF図上のマウスクリックでクリック位置に+印、

クリック位置の Euler 角度から整数の結晶方位を算出、更に整数の結晶方位から再計算 Euler 角度計算 ODF 図上に〇印を表示



---> (0,0,0,1)[2,-1,-1,0] ψ1=0.0 Φ=0.0 ψ2=0.0

---> (0,1,-1,2)[2,-1,-1,0] ψ1=0.0 Φ=42.5 ψ2=0.0



5. 6 各社 ODF 解析の逆極点図からND, TD, RDの方位を Plane、Direction で描画 Display により Plnae<->Direction 切り替えを行う。

ODF 解析の逆極点を Export し、読み込む、

ListDisp->[hkl]Intens->InverseDisp で描画する。

MunerseDisplayHexa 1.15YT[16/06/30] by CTR	
File Help Direction[uvw]	
<sub>rODF</sub> Display▶ <mark>Plane{hkl}</mark>	
✓ LaboTex □ p <mark>Direction[uvw]</mark> ools □ InverseAll	Other
_Material	
Material Data Titanium.txt	c/a= 1.5871
Inverse data select	
C#CTR#DATA#Ti-Inverse#Ti-Inverse.TPF	ND
LaboTex condition set	
Average-[0001]-[10-10]-[11-20]	x 15
_Inverse	
Max level 31.06 3D 💌 3D Max-value((max 1.0)	0.3 Data Disp List Disp
Window Width 800 Disp Intens. Level	1 [hkl] Intens. Inverse Disp

Direction で描画(材料表面法線方向に、[0001],[44-147],[50-56]などの方向が一致しています)

![](_page_12_Figure_5.jpeg)

Plane で描画(材料表面法線方向と、{0001},{11-23},{10-12}が直交しています)

![](_page_12_Figure_7.jpeg)

(90,50)で計算すると Direction と Plane が異なりますが
[137-200]->(90.0,50.17)を計算し、この角度から
Direction, Plane を計算すると一致します。
ステレオ三角形頂点と φ=90 は Direction と Plane は一致します。

🕅 InverseDirection 1.10 by CTR
File Help
Max index 15 Method Direction
Material Titanium.bxt φ 90.0 β 50.17 Calc
90.0 50.17> [11 9 0 ]> [13 7 -20 0]
Direction         u         11         v         9         w         0         Calc           u         13         v         7         t         -20         w         0         Calc
Plane           Max index         15         90.0 50.17> (13 7 0)           90.0 50.17> (13 7 -20 0)

## 5.7 各社 ODF 解析の再計算極点図を TXT2 ファイルに変換

ODF 解析の再計算極点図は Export できますが、各社異なったフォーマットのファイルが作成される この再計算極点図を CTR ソフトウエアで扱える TXT2 ファイル(α、β、Intens)に変換します。

MakePoleFile 1.64YT	[16/06/30] by CTR	
File Help		
File LaboTex(Red	alc or Additional Pole Figure(*.TPF))	
Exit TexTools(*.H	PF)	
-Step TEXT(*.TXT)		
TEXT2(*2.TX	T Alfa,Beta,Intens: *Polecenter=90)	
PoleFi StnadrdODF(	OutMax.txt->ODF13) 2 filena	ame HKL.TXT
popLA(*.RAW	0	
Bunge(*.PF)		
Bruker uxd fo	rmat (*.uxd β=0 : TD)	
GADDS popL	ARAW(*.RAW β=0: TD)	
M hoolig 51		
	C:\CTR\DATA\Ti-Inverse\Ti-Pole.TPF	
	Step Angles	
	5.udeg	
	PoleFigureCenter : 90  TXT2 TXT	Asc O TXT2 filename HKLTXT
	C:\CTR\DATA\Ti-Inverse\100_labotex-	-rp_2.TXT

TXT2 は、ODFPoleFigure2 ソフトウエアの解析結果と同一のフォーマット ASC は、ODFPoleFigure2 ソフトウエアの入力データフォーマット

NextSelect

 5.8 ODF 入力極点図のError 評価を行う ValueODFVF
 ODF への入力極点図には Error が含まれています。この評価を入力極点図と ODF 解析後の 再計算極点図で比較し、再測定、極点図処理を行います。
 Ti(002),(101)(102)極点図から ODF 解析を行い、再計算極点図を作成後、Error 評価

![](_page_13_Figure_5.jpeg)

プロファイルが±1.5%以内で入力データは正常です。

## 6. ODF解析によるVolumeFraction定量

LaboTex では、ODF 解析後、結晶方位の定量である VolumeFraction 計算を行えます。

入力極点図から解析した ODF 図

VolumeFraction (定量)から計算した ODF 図

![](_page_14_Figure_4.jpeg)

最大 ODF 値が小さいので、random レベルが高いと考えられ、ODF 図がほぼ一致しているので、 VolumeFraction 結果は正しいと考えられます。

数値的に行うのであれば、VolumeFarctionから極点図を作成し、valueODFVFで評価します。

VolumeFraction 結果

No.	VF(%)	Phil (FWHM)	Phi(FWHM)	Phi2(FWHN	A)	Orientation
1:	3.1	31.6	18.7	23.3	{ -1	24K210>
2:	5.9	29.2	38.8	20.1	{ 1	14人1-10>
3:	0.0	21.0	20.5	15.4	{ 1	13K1-10>
4:	0.9	14.2	23.1	17.6	{ 1	12K1-10>
5:	0.0	18.4	18.0	22.3	{ -1	28K0-41>
6:	1.3	33.4	13.4	28.9	{ 1	18次-4-41>
7:	5.3	44.0	30.6	39.5	{ 1	07K010>
8:	1.1	23.8	16.6	22.4	{ 1	03K010>
9:	82.37	Background V	Volume Fraction	1		

![](_page_14_Picture_9.jpeg)

82%が random 状態であることが分かります。

# 7. ODF解析による配向関数評価

LaboTex は ODF 内部で配向関数の計算が行えます。

Galculation of Anisotropy Factors 🛛 🔀							
Calculation for Hexagonal. Tetragonal and Orthorhombic Crystal Systems							
Fraction of Basal Planes (001) in Sample Directions LD TD ND							
f1	f2	f3					
Angles between Basal Planes (001) and Sample Directions							
LD	TD	ND					
a	Ь	c					
Kearns Factors (Fraction in Physical Property) LD TD ND							
0.2562	0.3290	0.4148					
fL	fT	fN					
Texture Index (F2) 0.23387 (normalized) (''0'' - Random. ''1'' - Monocrystal)							
Calculate							
End							

{002}極点図を Export して、Orientation で計算

Kearns Factors (Fraction in Physical Property) に一致します。

![](_page_15_Figure_5.jpeg)

# 8. ODF解析による逆極点評価

LaboTex では、 β が 0->60 の逆極点図で Plane で表示されます。各種 ODF に対応しています。

![](_page_16_Figure_2.jpeg)

InberDisplayHexa で β が 30->60 のデータで表示し、Plane、Direction で表示します。

ManverseDisplayHexa 1.15YT[16/06/30] by CTR							
File Help PlaneDisp{hk}							
ODF LaboTex popLA TexTools InverseAll Other							
Material Data Titanium.bxt c/a=	1.5871						
Inverse data select CVECTRVDATAVHCPVTI-ODFVLaboTexVCWVTI-3PE-Inverse.TPF	RD						
LaboTex condition set							
Average-[0001]-[10-10]-[11-20]  Maxindex 15							
- Inverse							
Max level 2.57 3D 💙 3D Max-value((max 1.0) 0.3 Data Disp	List Disp						
Window Width 800 V Disp Intens. Level 1 [hkl] Intens.	Inverse Disp						

RD 方向を Plane で表示 (ステレオ三角形の3 頂点は Plane=Direction)

![](_page_16_Figure_6.jpeg)