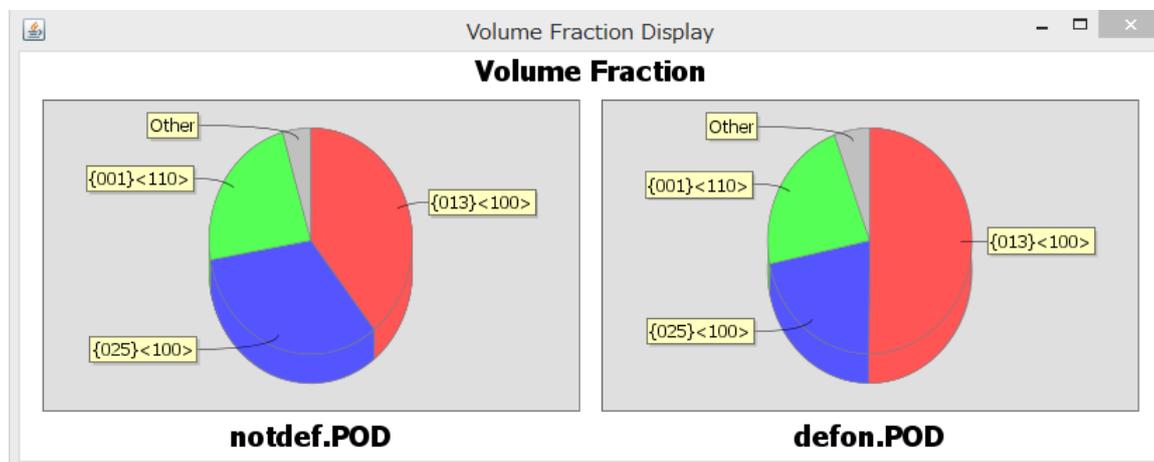


random試料が得難い材料

## Titaniumの結晶方位解析とVolumeFraction評価

Defocus 補正有り無しで VolumeFraction 結果は大きく異なります。



2019年06月16日

*HelperTex Office*

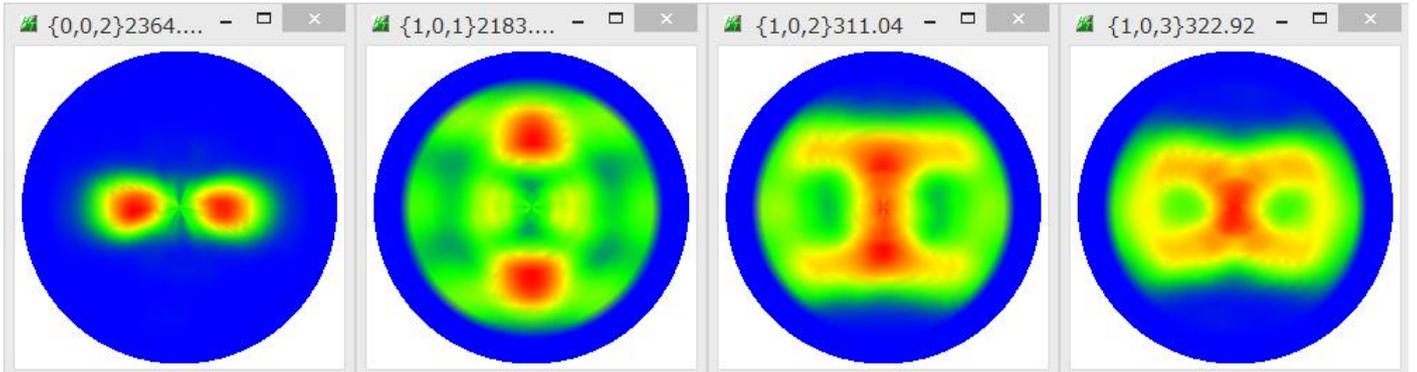
## 1. 概要

TitaniumやMagnesiumは粒径の細かい材料のrandom試料は得難くdefocus補正が難しい。

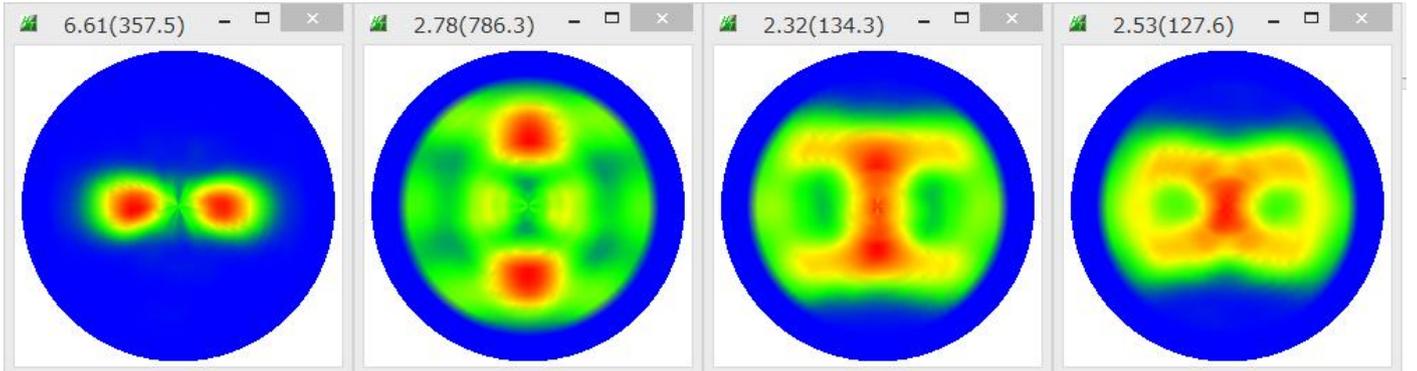
Titaniumの測定データを用いて、defocus補正のあるなしが解析結果に及ぼす影響を評価してみます。

## 2. 解析に使うデータ

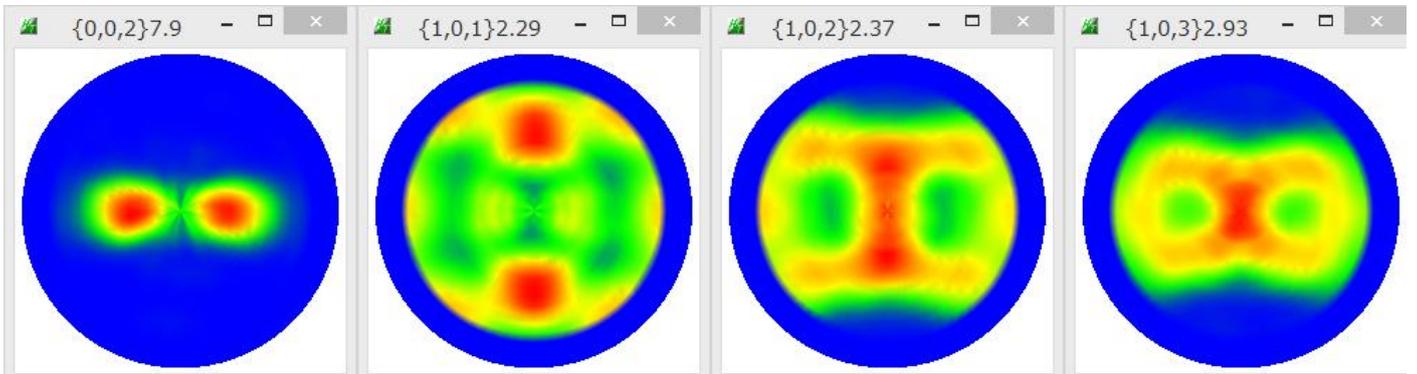
バックグラウンド削除と平滑化を行ったデータ



### 2. 1 規格化を行ったデータ

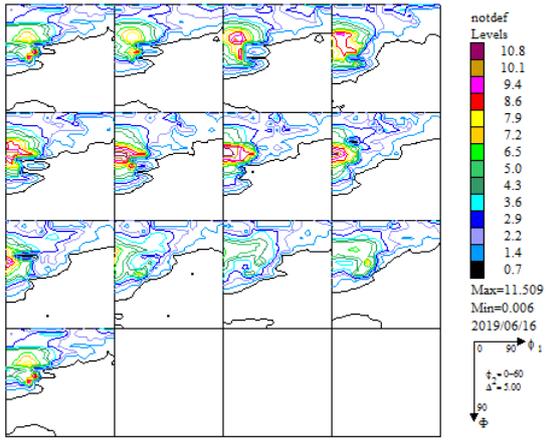


### 2. 2 計算random補正と規格化を行ったデータ

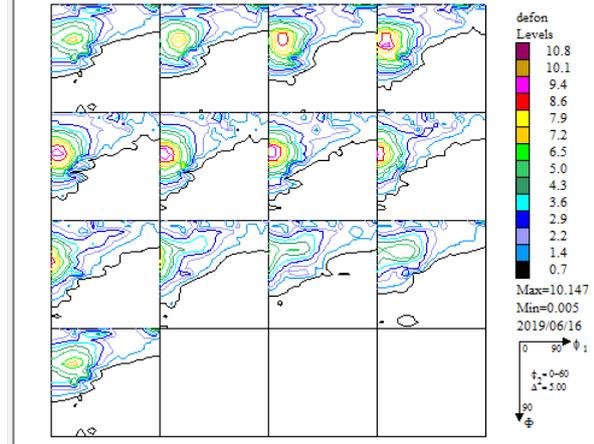


### 3. ODF 解析結果比較

defocus 補正なし

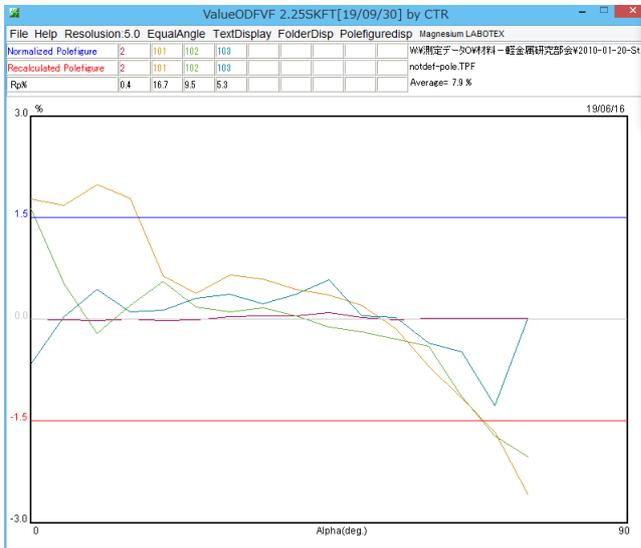


defocus 補正あり



再計算極点図から Rp%計算

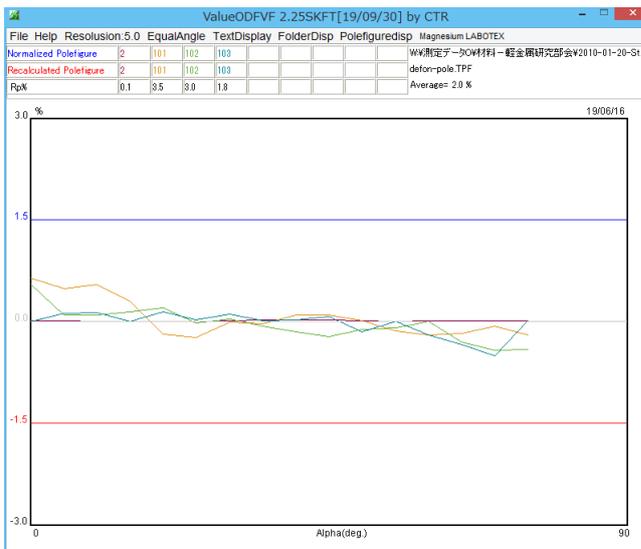
Defocusj 補正なし



Normalized Polefigure	2	101	102	103
Recalculated Polefigure	2	101	102	103
Rp%	0.4	16.7	9.5	5.3

notdef-pole.TPF  
Average= 7.9 %

Defocus 補正あり



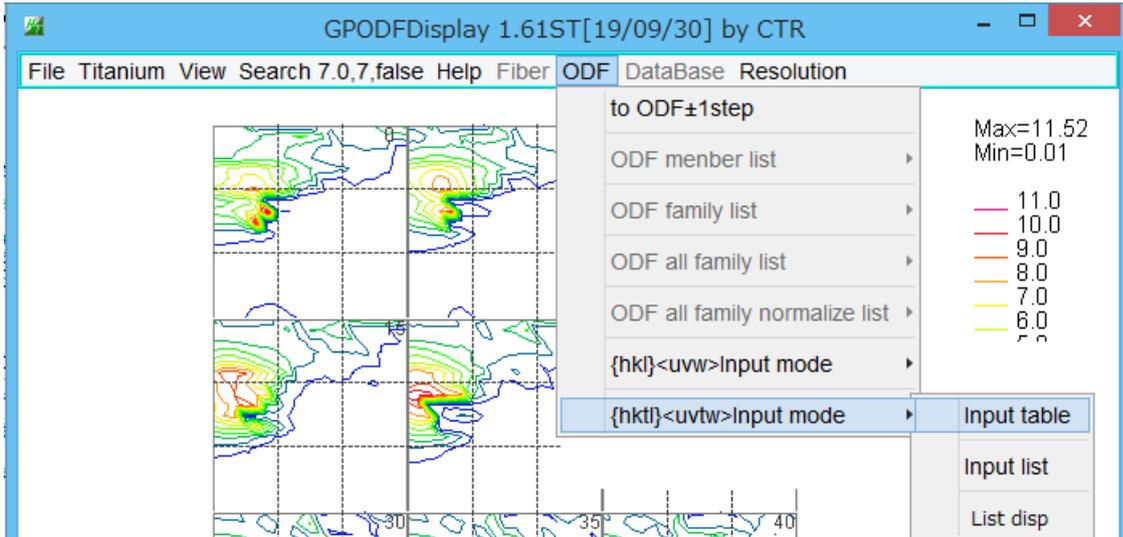
Normalized Polefigure	2	101	102	103
Recalculated Polefigure	2	101	102	103
Rp%	0.1	3.5	3.0	1.8

defon-pole.TPF  
Average= 2.0 %

defocus 補正を行わないと Rp% プラファイルが ±1.5% から外れ、平均値が 2.0% → 7.9% と大きな Rp% になります。

### 3. 1 defocus 補正ありなしによる結晶方位密度比較

GPODFDisplay ソフトウェアは読み込む結晶方位位置を入力出来ます。



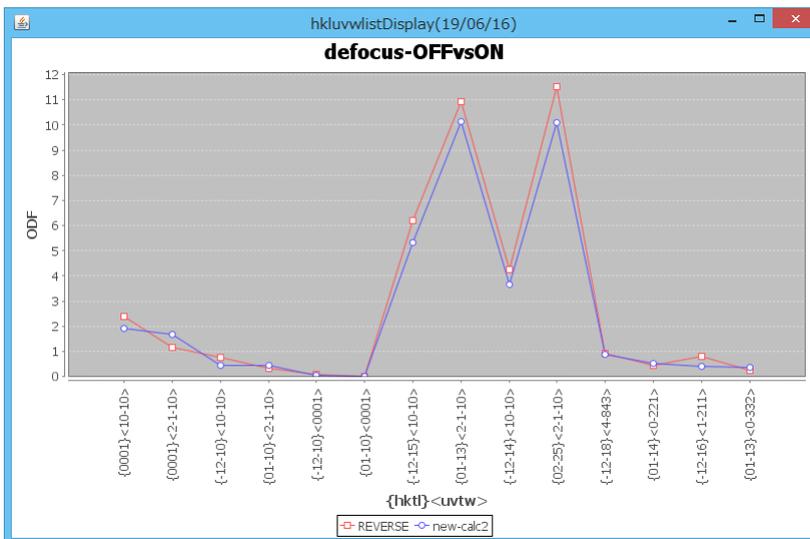
補正なし

補正あり

```
{hkl}<uvtw>,labotex
{0001}<10-10>,2.38
{0001}<2-1-10>,1.15
{-12-10}<10-10>,0.74
{01-10}<2-1-10>,0.34
{-12-10}<0001>,0.08
{01-10}<0001>,0.01
{-12-15}<10-10>,6.2
{01-13}<2-1-10>,10.93
{-12-14}<10-10>,4.25
{02-25}<2-1-10>,11.52
{-12-18}<4-843>,0.92
{01-14}<0-221>,0.45
{-12-16}<1-211>,0.79
{01-13}<0-332>,0.24
```

```
{hkl}<uvtw>,labotex
{0001}<10-10>,1.92
{0001}<2-1-10>,1.67
{-12-10}<10-10>,0.45
{01-10}<2-1-10>,0.45
{-12-10}<0001>,0.03
{01-10}<0001>,0.0
{-12-15}<10-10>,5.31
{01-13}<2-1-10>,10.15
{-12-14}<10-10>,3.64
{02-25}<2-1-10>,10.1
{-12-18}<4-843>,0.87
{01-14}<0-221>,0.54
{-12-16}<1-211>,0.39
{01-13}<0-332>,0.36
```

データ比較

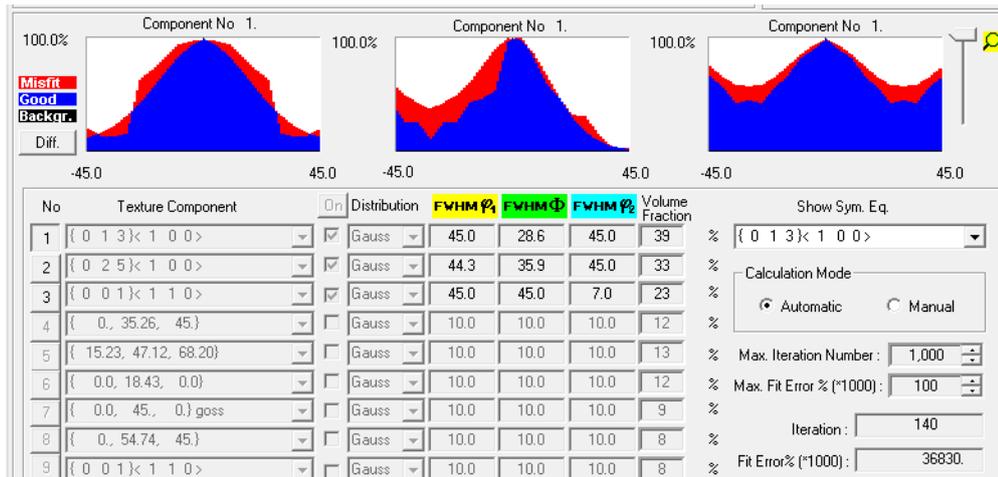


このデータからではどちらが正しいか判断出来ないが、R p %の結果から Defocus 補正ありを採用する。

結晶方位としては、{02-25}<2-1-10>,{01-13}<2-1-10>,{0001}<10-10>と考えられます。

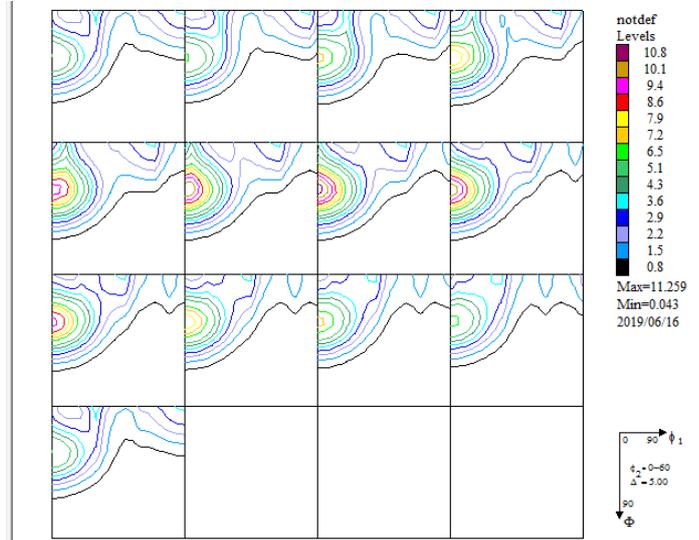
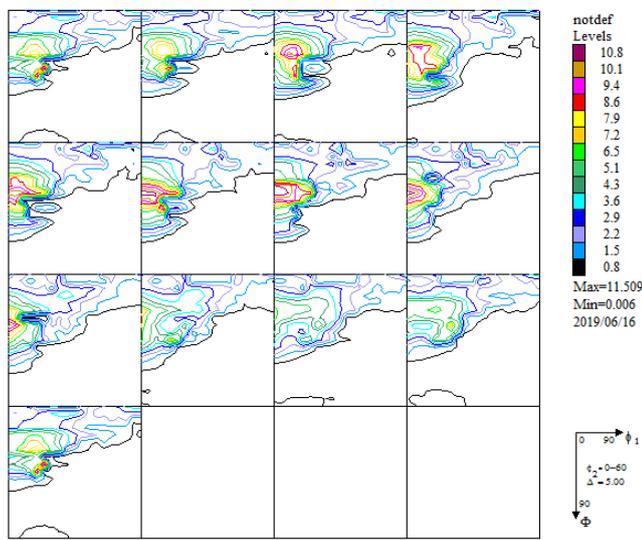
#### 4. VolumeFractionを比較する

##### 4.1 defocus補正なし

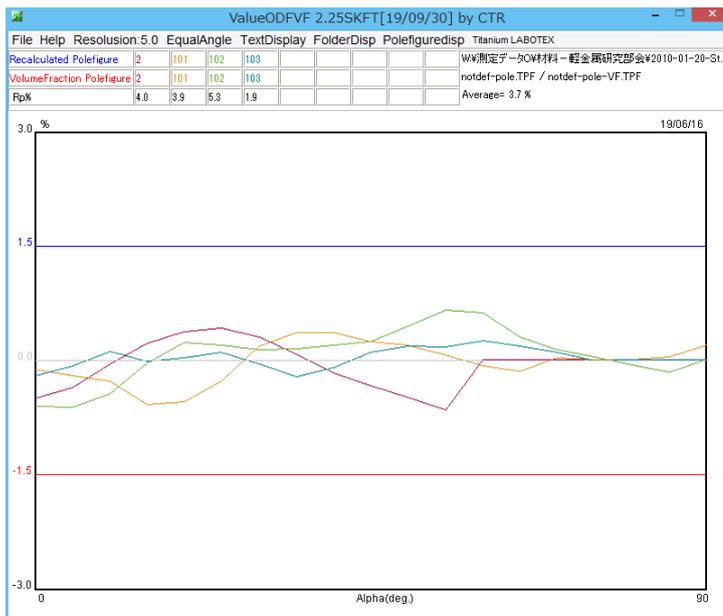


入力極点図から計算したODF図

上記 VolumeFraction から計算したODF図



再計算極点図とVolumeFraction結果の再々極点図から計算したRp%

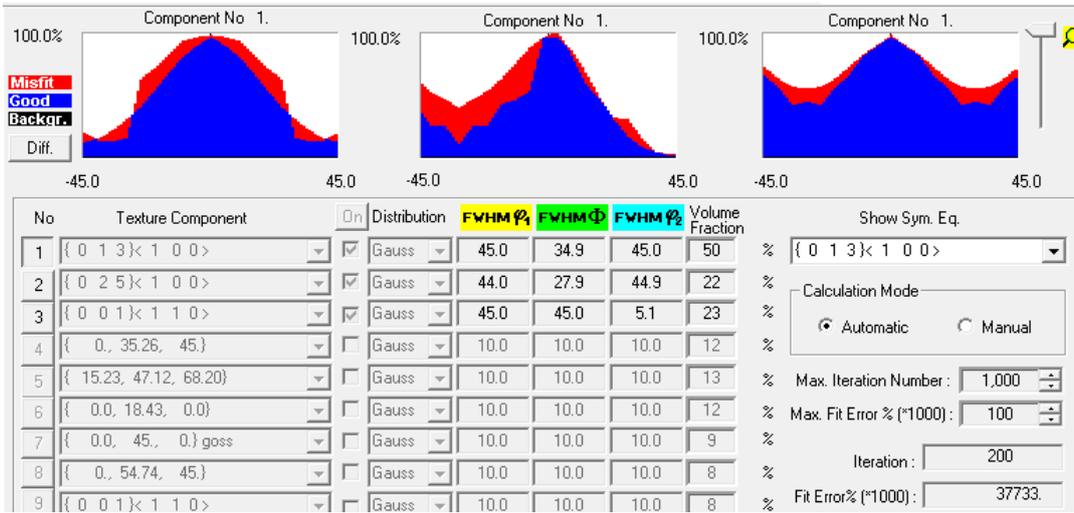


Recalculated Polefigure	2	101	102	103
VolumeFraction Polefigure	2	101	102	103
Rp%	4.0	3.9	5.3	1.9

notdef-pole.TPF / notdef-pole-VF.TPF  
Average= 3.7 %

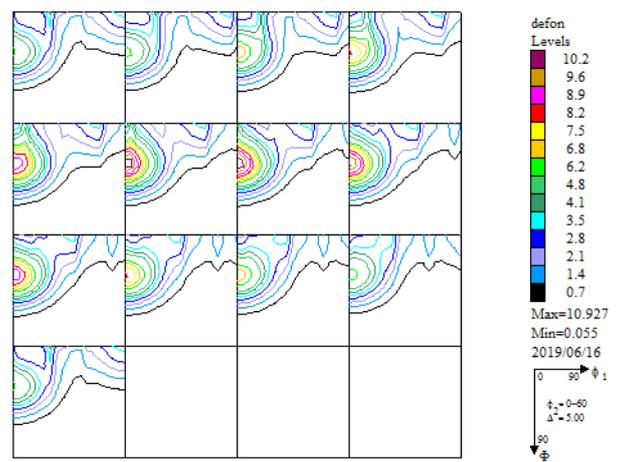
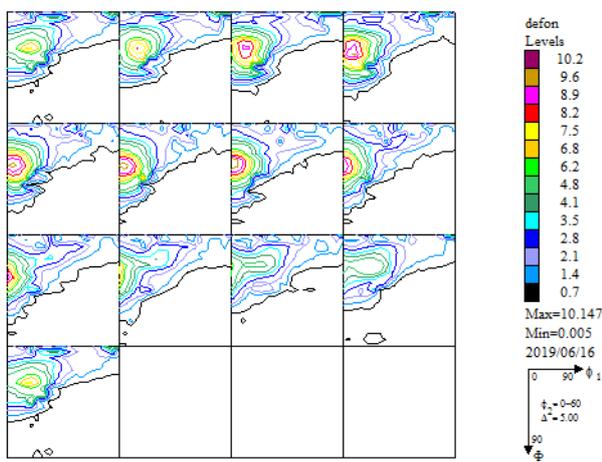
R p %が±1. 5%以内であり正しく計算されています。

#### 4. 2 defocus補正あり

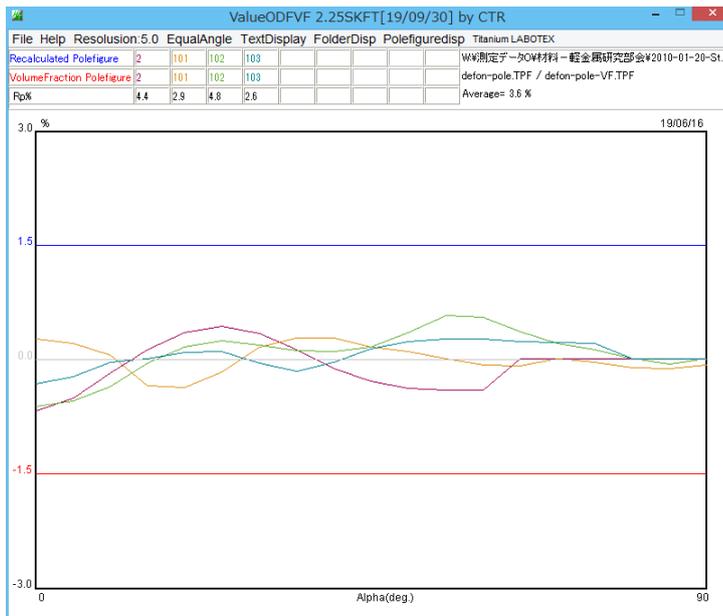


入力極点図から計算したODF図

上記 VolumeFraction から計算したODF図



再計算極点図とVolumeFraction結果の再々極点図から計算したRp%

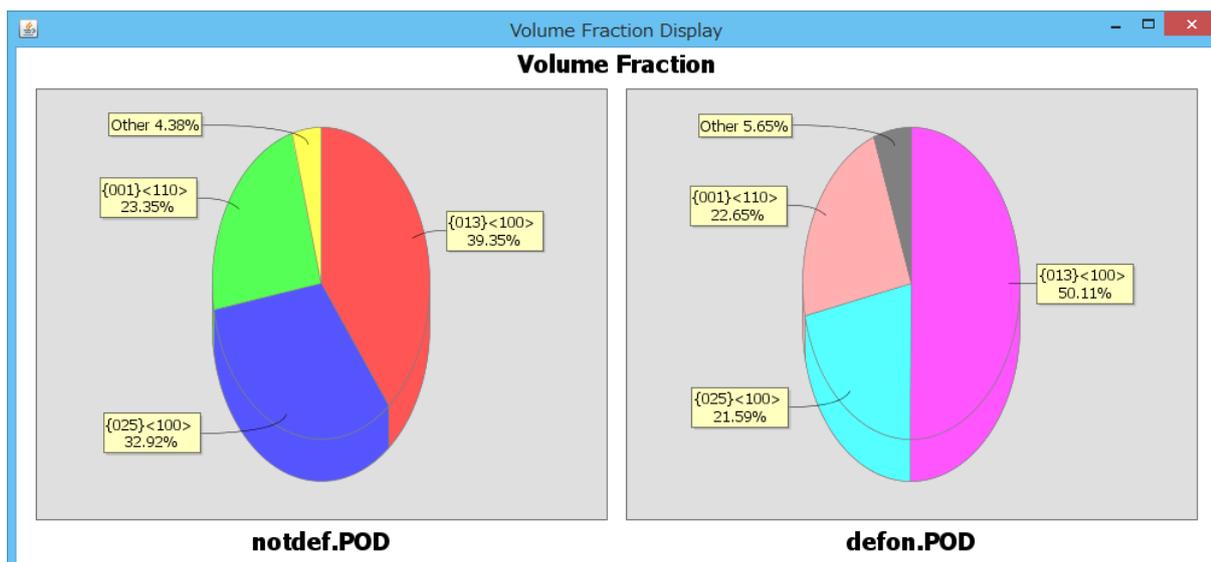


Recalculated Polefigure	2	101	102	103
VolumeFraction Polefigure	2	101	102	103
Rp%	4.4	2.9	4.8	2.6

defon-pole.TPF / defon-pole-VF.TPF  
Average= 3.6 %

R p %プロファイルが±1. 5 %以内であり正しく計算されています。

#### 4. 3 VolumeFraction比較



R p %プロファイルはどちらも±1.5%以内であったので VolumeFraction は正しく計算されているが、入力極点図と再計算極点図から計算したR p %プロファイルは d e f o c u s を行った結果が正しい為、上記 VolumeFraction は d e f o c u s ありが正しい結果と考えられます。

#### まとめ

正極点処理における d e f o c u s 補正を行わないと、結晶方位密度を歪め、VolumeFraction に大きく影響します。

粒径の細かい a r n d o m 試料が得られない場合、TenckhoffCalc ソフトウェアによる平滑化や ODFPoleFigure2 ソフトウェアによる計算 defocus などで defocus 曲線を作成し

ODF 解析後、R p %プロファイルが±1.5%以内になる事を確認し結果を得ることが重要です。

極点処理やODF解析はブラックボックスではありません。

R p %プロファイルを活用することで解析結果の評価が可能になります。