

LaboTexによる

結晶方位のシュミレーション

Rigaku,PANa,Bruker 社測定極点図から、ODF を試用出来るソフトウェアを
CDROM でご提供致します。

HelperTex へ問い合わせください。(odftex@ybb.ne.jp)

2016年04月07日

HelperTex Office

概要

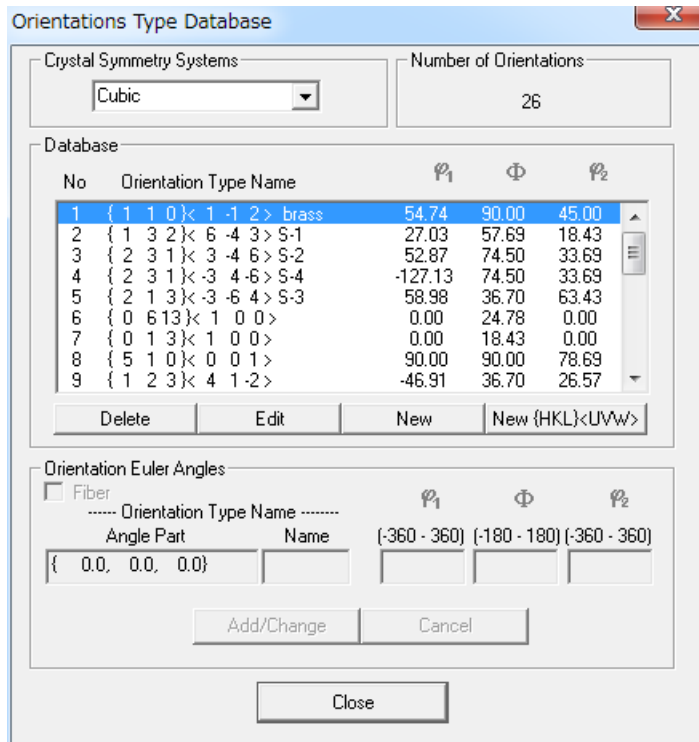
材料の異方性を調べる場合、極点測定からODF解析が行われ、結晶方位の定量が行われる。ODF図上の方位密度が高い位置のEuler角度 (ϕ_1 、 Φ 、 ϕ_2) から結晶方位(hkl)[uvw]が計算され、Euler角度の広がり を考慮した体積から定量が行われる。

極点図→ODF解析→結晶方位の定量が行われます。

結晶方位には、cube、brass、goss、copperなどがあり、これらがデータベース化されていて、ODF図とこのデータベースを見比べて可能性の高い結晶方位が自動的に検出されています。

今回は、LaboTexによる結晶方位→ODF→極点図、逆極点図の逆の流れを調べてみます。

LaboTexのデータベース

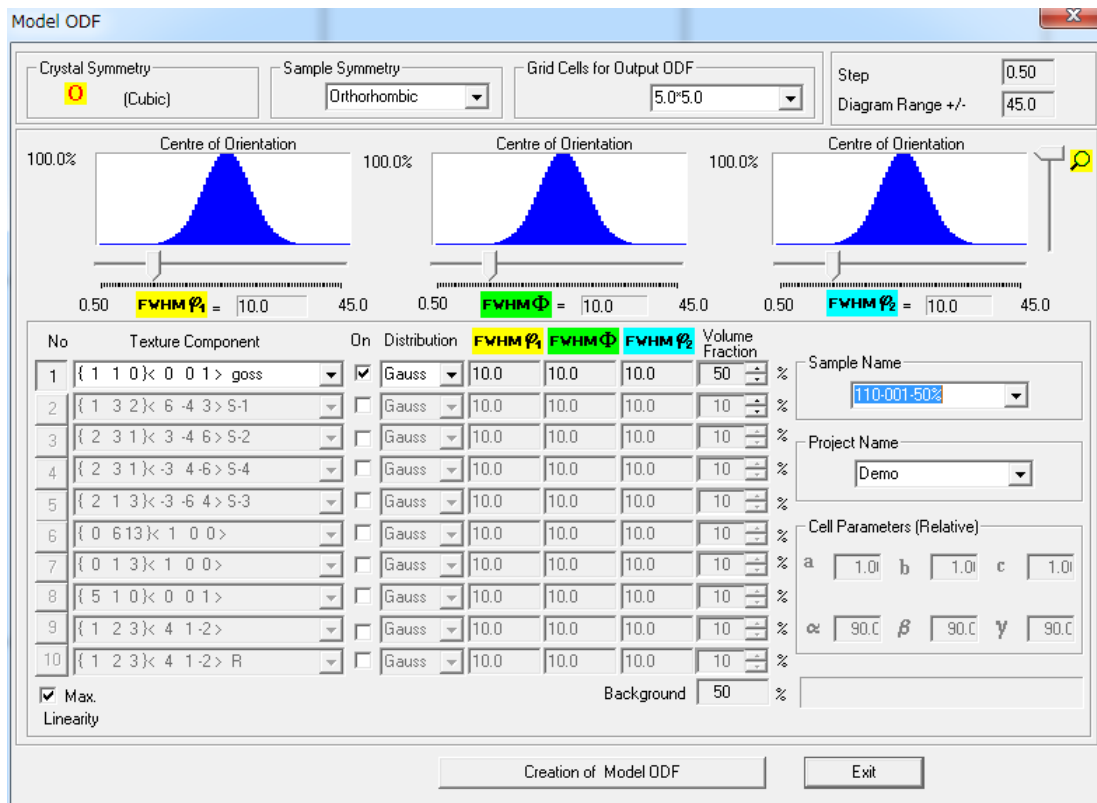


No	Orientation Type Name	ϕ_1	Φ	ϕ_2
10	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R	-46.91	36.70	26.57
11	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	90.00	90.00	45.00
12	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > coppe	-90.00	35.26	45.00
13	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	0.00	0.00	0.00
14	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	-105.79	45.00	90.00
15	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >	35.26	90.00	45.00
16	{ 1 2 2 } < 2 -2 1 >	26.57	48.19	26.57
17	{ 1 1 2 } < 1 -1 0 >	0.00	35.26	45.00
18	{ 1 1 1 } < -1 -1 2 >	90.00	54.74	45.00

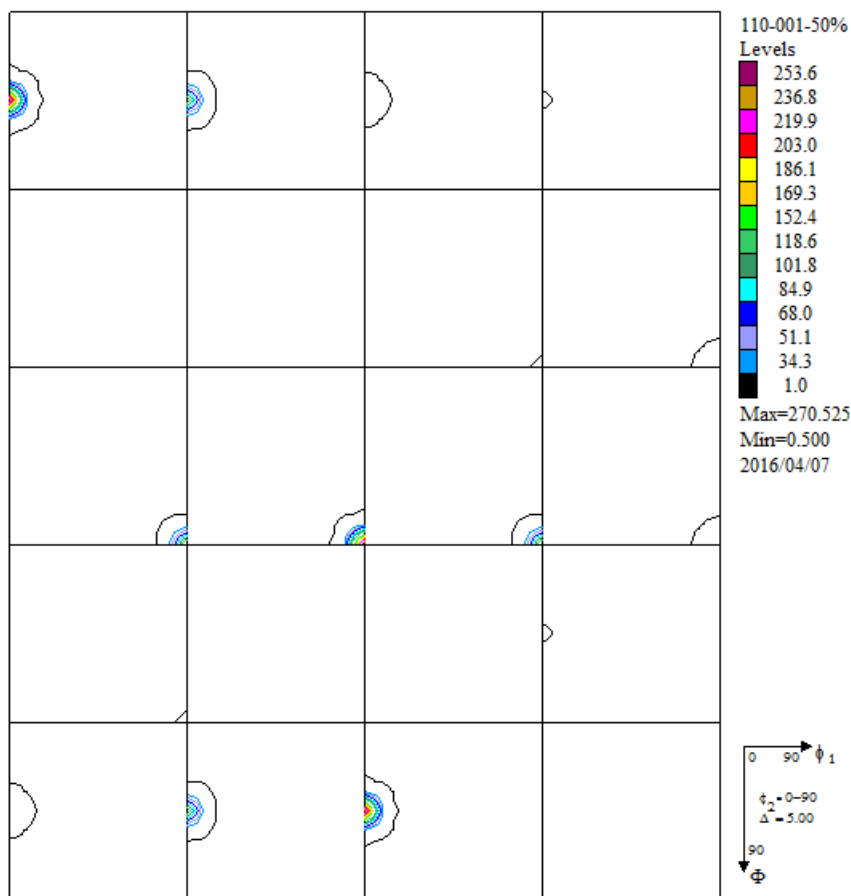
No	Orientation Type Name	ϕ_1	Φ	ϕ_2
18	{ 1 1 1 } < -1 -1 2 >	90.00	54.74	45.00
19	{ 3 2 3 } < 1 -3 1 >	23.09	50.24	56.31
20	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	-45.00	0.00	0.00
21	{ 2 3 3 } < 0 1 -1 >	-113.09	50.24	33.69
22	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	15.23	47.12	68.20
23	{ 1 1 3 } < 1 -1 0 >	0.00	25.24	45.00
24	{ 1 1 1 } < 0 1 -1 >	-120.00	54.74	45.00
25	{ 1 1 4 } < -1 -7 2 >	54.74	19.47	45.00
26	{ 0 1 3 } < 0 -3 1 >	90.00	18.43	0.00

26種類の結晶方位が登録されていて、追加も可能

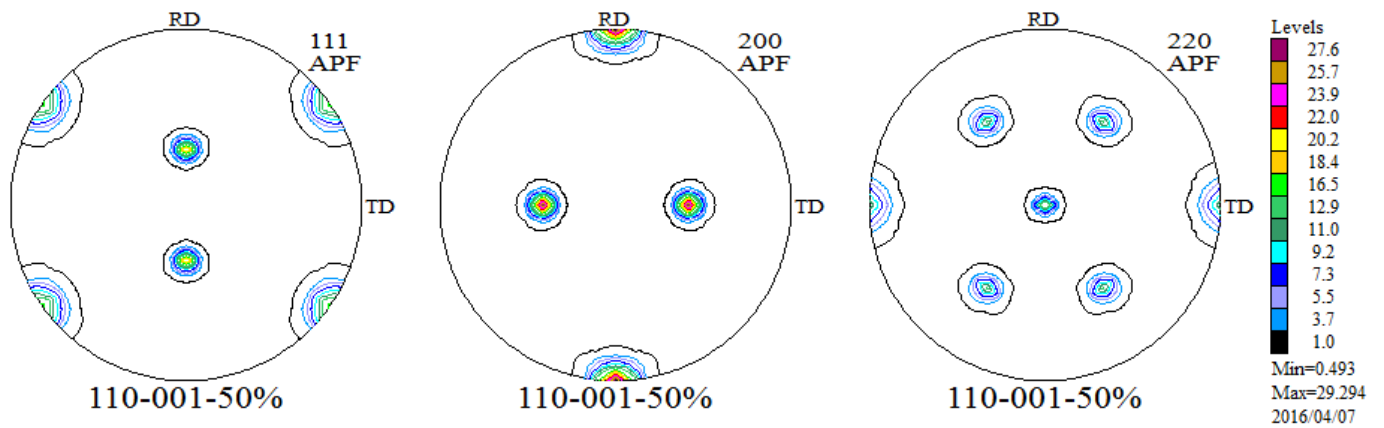
結晶方位として g o s s 方位、50%をシュミレーションしてみます。



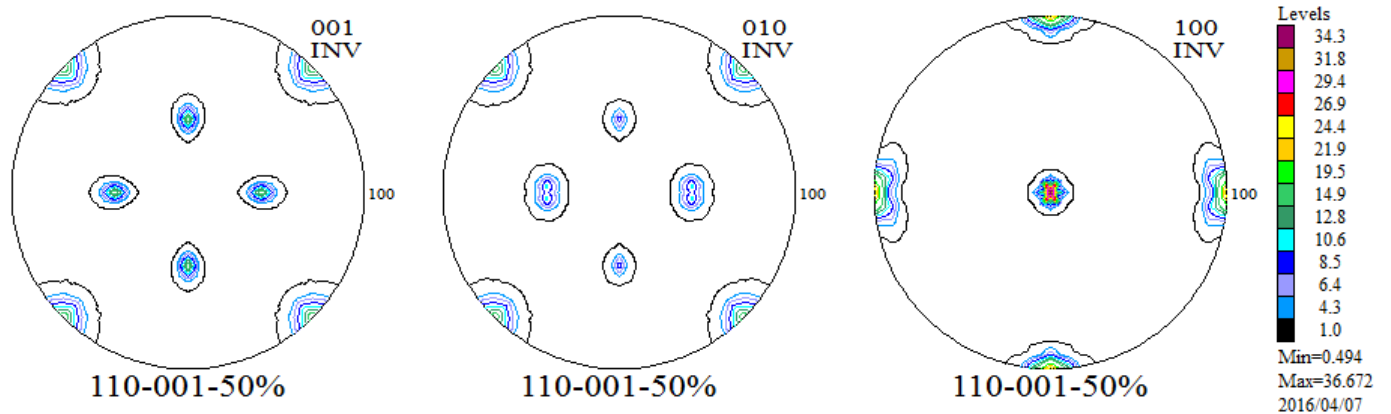
作成されるODF図



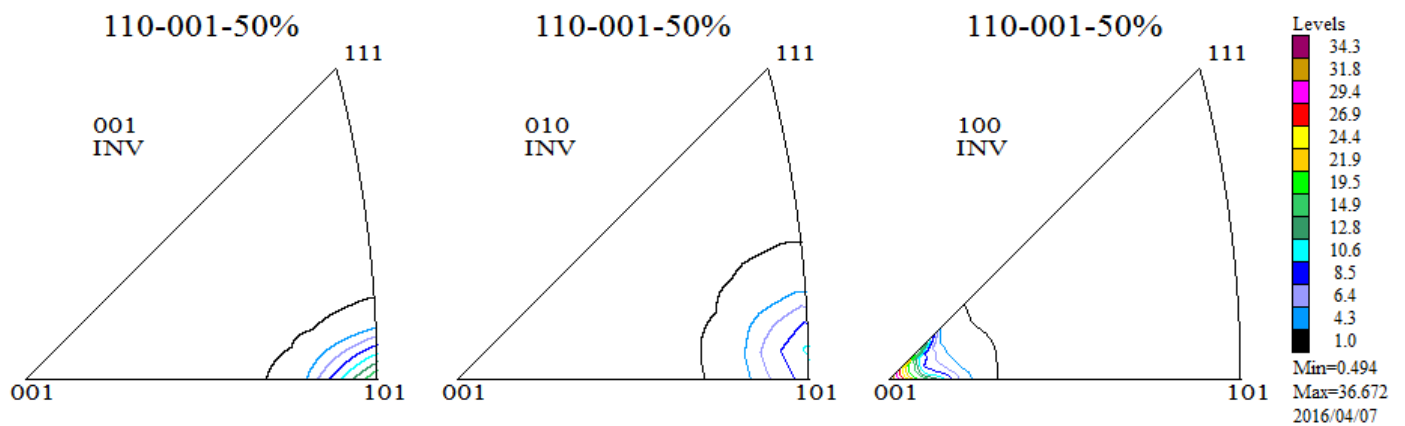
作成される極点図



作成される Full 逆極点図

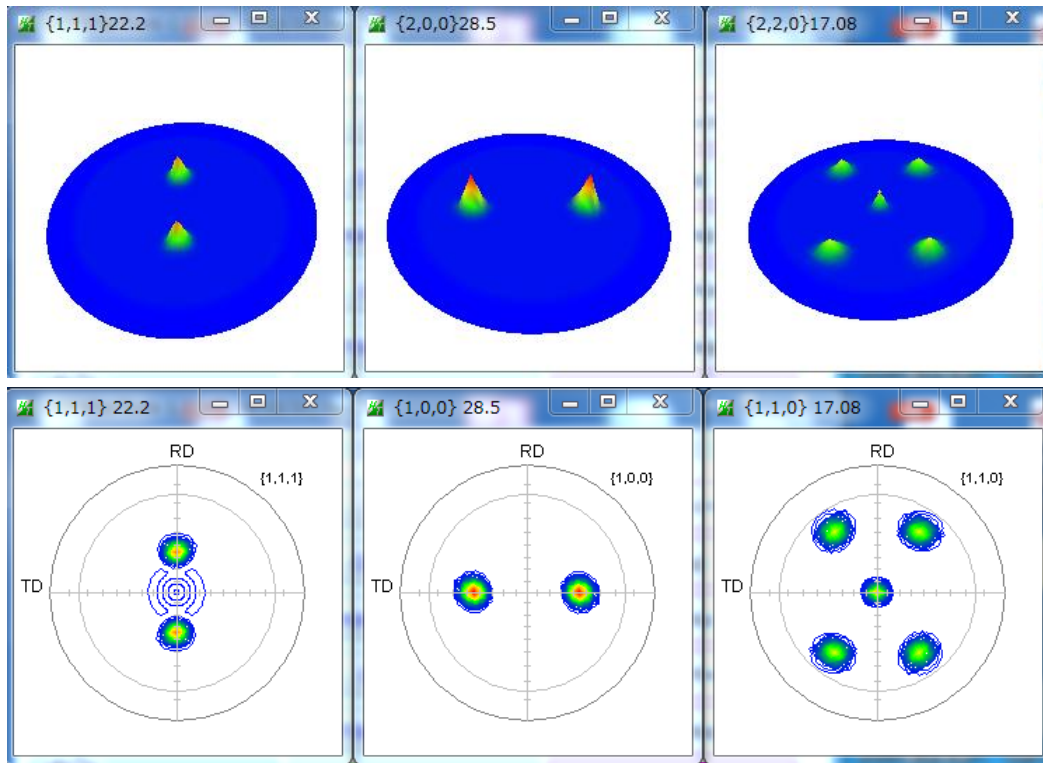


作成される逆極点図

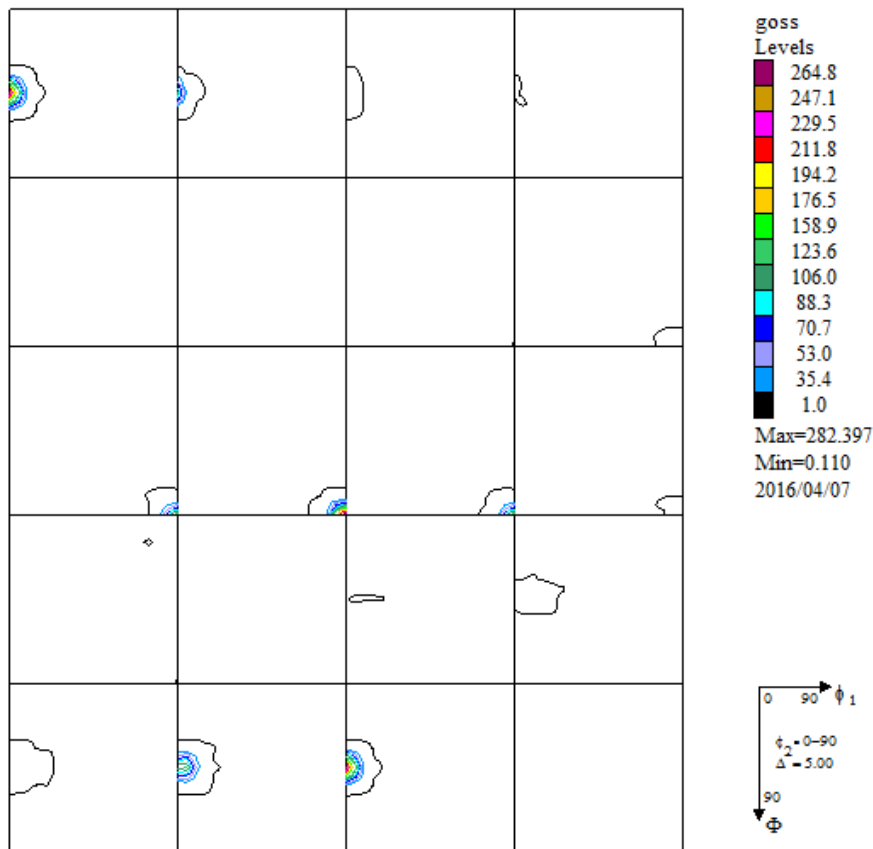


極点図測定からの流れ

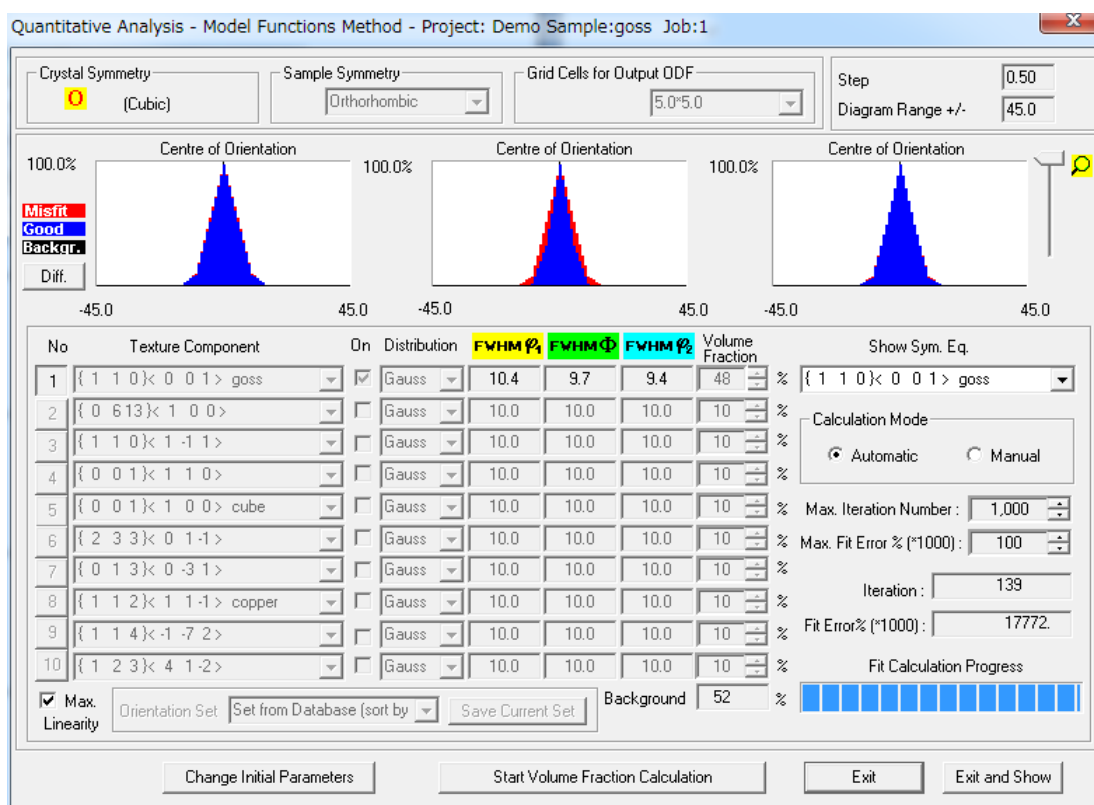
入力極点図 (CTRソフトウェア)



LaboTexによるODF解析

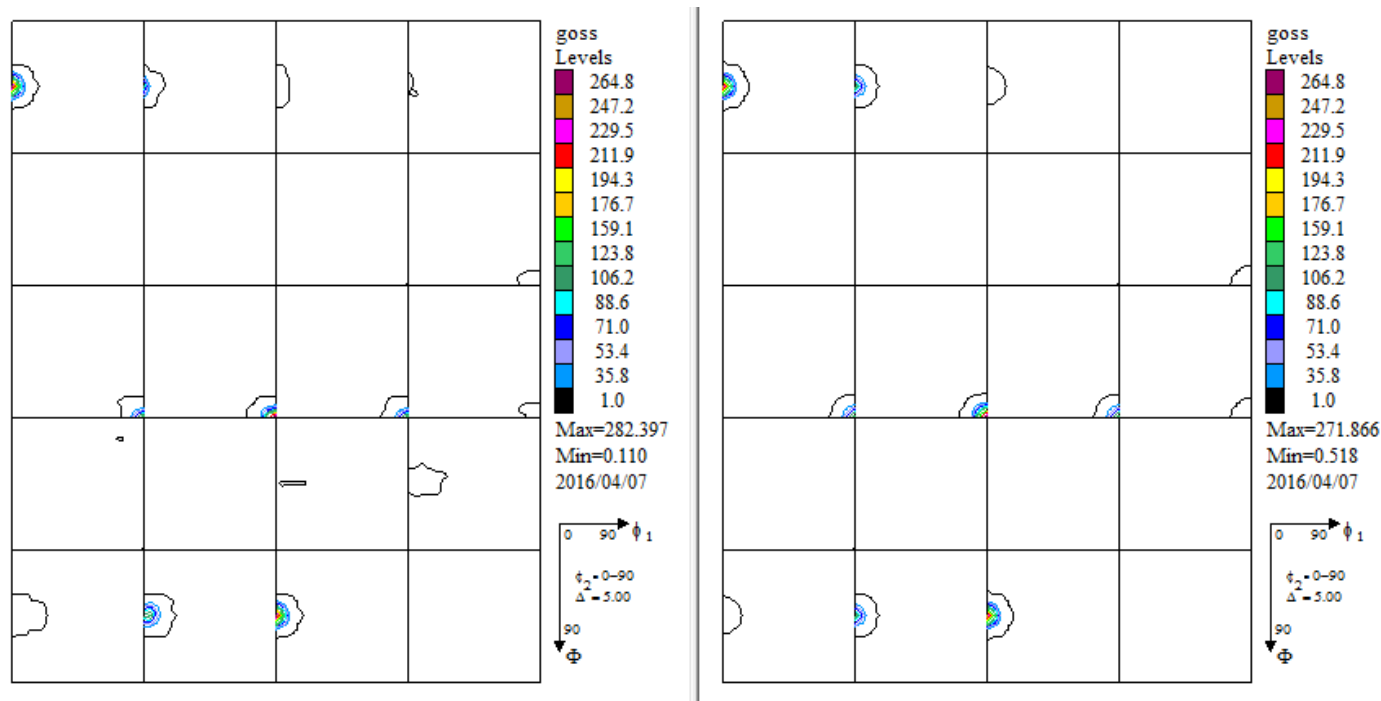


結晶方位の定量



VolumeFraction として 48% が求められます。

入力極点図から計算した ODF 図 (左) と定量結果、goss 48% から計算した ODF 図 (右)



CTRソフトウェアと各種ODF解析ソフトウェアはHelperTex Officeで扱っています。
ODF解析を試用出来るCDROMを配布しております。HelperTexサイトから請求して下さい。

HelperTex Office