

X線集合組織の各解析ソフトウェアとの比較

○岡安 和人

横浜国立大学 工学研究院等技術部

1.はじめに

優先方位をもつ多結晶体の結晶方位分布状態を結晶集合組織、あるいは単に集合組織という[1]。集合組織測定は電子回折、エックス線回折、中性子回折等により行われるが、解析ソフトウェアはそれぞれのメーカーで作られていて、解析手法についても様々存在する。測定に使用しているエックス線回折装置、Ultima IVは2013年3月に導入された装置であり、すでに12年を経過している。集合組織用解析ソフトウェアとしてはStandardODF、TexTools、LaoTexが使用できるようになっている。コマンドを使って繰返し計算を行うDahms-Buge法[2]にも対応していたが、この方法は一般的なPCのOSがWindowsXPから7にOSが置き換わった際にコマンドがうまく動かなくなったことから使われなくなっていった。

近年X線装置でX線が発生できなくなる事態が2度発生しており、メーカーからは制御PCの更新を勧められている。2025年度に入りWindows7からWindows11へのアップグレードに関する見積を取った際、集合組織解析ソフトウェアに関してはSmartLab Studio II(SLS II)のTextureプラグイン[3]以外はサポートしない旨の説明があった。このため、過去の同一のデータから結晶方位分布関数(ODF)の計算を行うことで整合性を調べることにした。

2.方法

集合組織を見る場合、まずは測定極点図を見ることになる。測定極点図は基本的にどのソフトウェアでも同じである。その後ODFを決定するのであるが、これが様々ある。TexToolsとLaboTexはADC法[4]である。StandardODFは球面調和関数による級数展開法[5]であり、基本的にはDahms-Bunge法である。一方でSLS IIではWIMV法[6]とコンポーネント法[7]であり、これまでとは計算手法が異なるため、それぞれを計算し比較を行った。試料はFe-3mass%Si合金を900°C、ひずみ速度 $5.0 \times 10^{-4} \text{s}^{-1}$ 、大気中で真ひずみ-1.0まで平面ひずみ圧縮変形した試料であり、圧縮軸(ND)に{001}、伸長方向(RD)に<110>が発達する集合組織であることがわかっている。SLS IIではコンポーネント法を試みた。

3.結果

図1は(a)StandardODF、(b)TexTools、(c)SLSIIでODFを決定し、ND、RDにおける逆極点図を示した。これらの逆極点図は平均の軸密度を1とした等高線で表している。級数展開法である(a)は数学的に矛盾がないように再計算を行うためか、極点図は丸みを帯びた形状で強度が小さめとなる傾向がある。(b)はDiscrete法あるいは直接法とも呼ばれ、1点、1点を積み重ねて計算する手法であり、強度が高く出やすく、等高線も比較的ギザギザした形になることが特徴である。ギザギザについては測定データを変換する際、スムージングを行うことで改善は可能である。ちなみにWIMV法も直接法の一つである。一方SLS IIはコンポーネント法という手法であり、主要成分を元に計算するらしく、結果は強度が少し小さめで滑らかな等高線であり、球面調和関数を使ったStandardODFやDahms-Bunge法の結果に近い印象である。ただ今回の結果のみで考えると(a)ではRDよりNDの強度が高く、(b)、(c)ではNDよりRDの強度が高くなっており、大きな違いではないが、さらに試してみる必要がある。

