



(12)发明专利

(10)授权公告号 CN 106970098 B

(45)授权公告日 2020.05.22

(21)申请号 201610821660.5

(22)申请日 2016.09.13

(65)同一申请的已公布的文献号
申请公布号 CN 106970098 A

(43)申请公布日 2017.07.21

(30)优先权数据
2015-186004 2015.09.13 JP

(73)专利权人 株式会社理学
地址 日本国东京都

(72)发明人 安川昇一

(74)专利代理机构 中科专利商标代理有限责任
公司 11021
代理人 李逸雪

(51)Int.Cl.

G01N 23/207(2006.01)

(56)对比文件

US 4489425 A, 1984.12.18, 摘要, 说明书第
9栏, 第7栏第51-53行, 摘要附图.

US 4686631 A, 1987.08.11, 全文.

JP 特开2015-99145 A, 2015.05.28, 全文.

郑轩等. 基于d₀误差项直接精密解法DRS的
X射线应力分析技术.《2018远东无损检测新技术
论坛》.2018, 809-819.

审查员 朱筠清

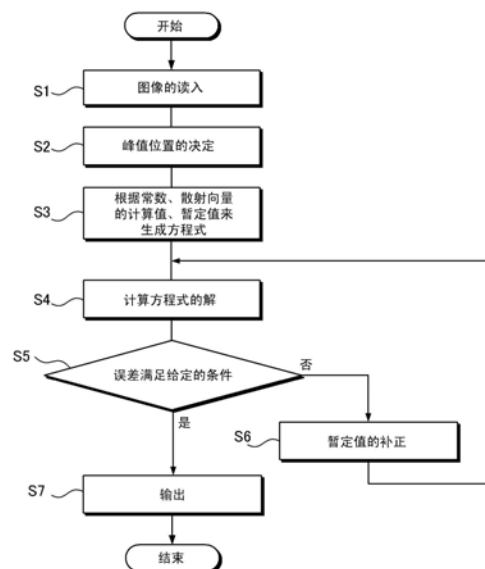
权利要求书1页 说明书9页 附图7页

(54)发明名称

应力解析装置、方法以及程序

(57)摘要

提供一种能够提高应力值的精度的应力解析装置、方法以及程序。用于计算试样(S)的残留应力的应力解析装置(100), 具备: 解析部, 其在与试样(S)的表面垂直的方向的应力为恒定时, 采用包含误差的项且表示应力与应变的关系的方程式, 利用基于针对多个散射向量的衍射X射线的测量值和暂定值, 将误差计算为解之一; 和暂定值补正部, 其利用所计算出的所述误差来补正暂定值, 解析部以及补正部反复进行误差的计算以及暂定值的补正。



1. 一种应力解析装置, 计算试样的残留应力, 其特征在于, 具备:

解析部, 其在与试样的表面垂直的方向的应力为恒定时, 采用包含误差的项且表示应力与应变的关系的方程式, 利用基于针对多个散射向量的衍射X射线的测量值和暂定值, 将所述误差计算为解之一; 和

暂定值补正部, 其利用所计算出的所述误差来补正所述暂定值,

所述解析部以及补正部反复进行所述误差的计算以及所述暂定值的补正,

所述暂定值补正部使晶格面间距的误差率近似为等于将正负反转后的应变的误差来补正所述暂定值。

2. 根据权利要求1所述的应力解析装置, 其特征在于,

该应力解析装置还具备: 输出部, 该输出部将在所述方程式中代入所补正后的所述暂定值的最终值时得到的各应力值作为解析结果来输出。

3. 根据权利要求1或2所述的应力解析装置, 其特征在于,

所述解析部利用最小自乘法来计算所述方程式的解。

4. 一种应力解析的方法, 计算试样的残留应力, 其特征在于, 包括:

在与试样的表面垂直的方向的应力为恒定时, 采用包含误差的项且表示应力与应变的关系的方程式, 利用基于针对多个散射向量的衍射X射线的测量值和暂定值来计算所述误差的步骤; 和

使晶格面间距的误差率近似为等于将正负反转后的应变的误差并利用所计算出的所述误差来补正所述暂定值的步骤,

反复进行所述误差的计算以及所述暂定值的补正。

应力解析装置、方法以及程序

技术领域

[0001] 本发明涉及使用衍射X射线的测量结果来计算试样的残留应力的应力解析装置、方法以及程序。

背景技术

[0002] 作为基于X射线的单一入射的应力解析法而公知 $\cos\alpha$ 法。 $\cos\alpha$ 法用于如下情形：以接下来说明的原理，根据利用二维检测器而得到的单一的X射线衍射图像来解析2轴应力。

[0003] 若如下定义各代号，则采用装置坐标轴上的垂直应变 ε_{11} 、 ε_{22} 、剪切应变 ε_{12} ，将在德拜-谢乐 (Debye-Scherrer) 环的 α 的位置处观测的试样的垂直应变 $\varepsilon(\alpha)$ 表示为公式(1)。即，在应力场为2轴的情况下，在二维检测器上，公式(1)的关系成立。

[0004] ψ_0 ：试样面法线与入射X射线所成的角度

[0005] α ：相对于入射X射线而垂直配置的二维检测器上的德拜-谢乐环的旋转角

[0006] $2\eta_\alpha$ ：入射X射线和衍射X射线所成的角度，与衍射角度 $2\theta_\alpha$ 存在 $2\eta_\alpha = \pi - 2\theta_\alpha$ 的关系

[0007] $2\theta_\alpha$ ：在德拜-谢乐环的 α 的位置处的衍射角度

$$\begin{aligned} \varepsilon(\alpha) = & (\sin \psi_0 \sin \theta_\alpha - \cos \psi_0 \cos \alpha \cos \theta_\alpha)^2 \varepsilon_{11} \\ & + \sin^2 \alpha \cos^2 \theta_\alpha \varepsilon_{22} \quad \dots (1) \\ & + \sin \alpha \cos \theta_\alpha (\sin \psi_0 \sin \theta_\alpha - \cos \psi_0 \cos \alpha \cos \theta_\alpha) \varepsilon_{12} \end{aligned}$$

[0009] 此处，将2个值 $\varepsilon_{\alpha 1}$ 、 $\varepsilon_{\alpha 2}$ 定义如下。

$$[0010] \quad \varepsilon_{\alpha 1} = \frac{\{\varepsilon(\alpha) - \varepsilon(\pi + \alpha)\} + \{\varepsilon(-\alpha) - \varepsilon(\pi - \alpha)\}}{2}, \quad \dots (2)$$

$$[0011] \quad \varepsilon_{\alpha 2} = \frac{\{\varepsilon(\alpha) - \varepsilon(\pi + \alpha)\} - \{\varepsilon(-\alpha) - \varepsilon(\pi - \alpha)\}}{2} \quad \dots (3)$$

[0012] 若设为 $2\theta_\alpha$ 或者 η_α 相对于 α 不变，则得到如下关系。

$$\begin{aligned} [0013] \quad \varepsilon_{\alpha 1} = & -S_2 \sin \psi_0 \cos \psi_0 \cos \alpha \sin 2\eta \sigma_{11} \\ \varepsilon_{\alpha 2} = & S_2 \sin \psi_0 \sin \alpha \sin 2\eta \sigma_{12} \quad \dots (4) \end{aligned}$$

[0014] 若基于公式(4)，将对于 $\varepsilon_{\alpha 1}$ 、 $\varepsilon_{\alpha 2}$ 的 $\cos\alpha$ 、 $\sin\alpha$ 的描绘以直线进行近似，则根据其斜率而分别得到 σ_{11} 、 σ_{12} 。该方法就是 $\cos\alpha$ 法。

[0015] 关于 $\cos\alpha$ 法，例如，在非专利文献1中公开为：根据由纤维强化Ti合金的同步加速器X射线得到的测量结果来求取局部应力的方法。根据非专利文献1，确认出：由利用 $\cos\alpha$ 法计算出的压缩应力分布所得的龟裂开口的应力与所测量的开口应力一致。

[0016] 此外，在非专利文献2中，记载了：将扩展项的想法应用于应力与应变的公式。在非专利文献2中，记载了：将伪静压应力项 (pseudo hydrostatic strain component) 的 ε_{ph} 作为扩展项 (dilatation term) 而追加到公式中。于是，提出：通过该扩展项，即使不知道应力为零时的正确的晶格常数，也能够计算应力值。

[0017] 非专利文献

[0018] 非专利文献1:K.TANAKA,Y.AKINIWA,“Diffraction Measurements of Residual Macrostress and Microstress Using X-Rays,Synchrotron and Neutrons”,JSME International Journal.Series A,v.47,n.3,Jul,2004,p.252-263

[0019] 非专利文献2:Baoping Bob He,Kingsley L.Smith,Strain and Stress Measurements with a Two-Dimensional Detector,JCPDS-International Centre for Diffraction Data 1999,P505

[0020] 如上所述,在 $\cos\alpha$ 法中,通过将近似直线的常数项设为独立变量,从而排除因 d_0 的误差而引起的较大的误差。但是,由于本来是以相对于 α 呈不变这一假设来解析作为 α 的函数的 $2\theta_\alpha$ 或者 η_α 的,因此,并未严密地考虑到符合德拜-谢乐环的散射向量,计算结果中包含因该假设而引起的误差。

[0021] 此外,在试样的结晶粒径粗大的情况下,必须以部分缺损而产生的德拜-谢乐环作为解析对象,无法适用 $\cos\alpha$ 法。另一方面,尽管也可以不进行 $\cos\alpha$ 法这样的近似而考虑采用一般式的解析方法,但是无法直接求解,若采用包含误差的晶格面间距的值,则计算结果中也会包含误差。

发明内容

[0022] 本发明鉴于上述问题,其目的在于,提供一种通过考虑到散射向量且导入误差项来改良重复解,从而能够提高应力值的精度的应力解析装置、方法以及程序。

[0023] (1) 为了实现所述目的,本发明的应力解析装置,用于计算试样的残留应力,其特征在于,具备:解析部,其在与试样的表面垂直的方向的应力为恒定时,采用包含误差的项且表示应力与应变的关系的方程式,利用基于针对多个散射向量的衍射X射线的测量值和暂定值,将所述误差计算为解之一;和暂定值补正部,其利用所计算出的所述误差来补正所述暂定值,所述解析部以及补正部反复进行所述误差的计算以及所述暂定值的补正。

[0024] 通过这样考虑到散射向量且导入误差项来对重复解进行改良,从而能够提高应力值的精度。此外,即使结晶粒径变得粗大而产生数据的缺损,也能够获得解析结果。并且,例如,虽然所述的误差项是表示应变的误差的项,暂定值是试样中无应变时的晶格面间距 d_0 的暂定值,但是,误差、暂定值并不取决于这样的表达。

[0025] (2) 此外,本发明的应力解析装置的特征在于,所述暂定值补正部使晶格面间距的误差率近似为等于将正负反转后的应变的误差来补正所述暂定值。由此,能够容易地对无应变状态下的晶格面间距的暂定值进行补正。

[0026] (3) 此外,本发明的应力解析装置的特征在于,还具备:输出部,其将在所述方程式中代入所补正后的所述暂定值的最终值时得到的各应力值作为解析结果来输出。能够通过这样排除误差来获得各应力值。

[0027] (4) 此外,本发明的应力解析装置的特征在于,所述解析部利用最小自乘法来计算所述方程式的解。由此,根据观测方程式就能够容易地计算出误差、应力。

[0028] (5) 此外,本发明的方法,用于计算试样的残留应力,其特征在于,包括:在与试样的表面垂直的方向的应力为恒定时,采用包含误差的项且表示应力与应变的关系的方程式,利用基于针对多个散射向量的衍射X射线的测量值和暂定值来计算所述误差的步骤;和利用所计算出的所述误差来补正所述暂定值的步骤,反复进行所述误差的计算以及所述暂

定值的补正。通过这样考虑到散射向量且导入误差项来对重复解进行改良,从而能够提高应力值的精度。

[0029] (6)此外,本发明的程序,是用于计算试样的残留应力的应力解析程序,其特征在于,使计算机执行如下处理:在与试样的表面垂直的方向的应力为恒定时,采用包含误差的项且表示应力与应变的关系的方程式,利用基于针对多个散射向量的衍射X射线的测量值和暂定值来计算所述误差的处理;和利用所计算出的所述误差来补正所述暂定值的处理,反复进行所述误差的计算以及所述暂定值的补正。通过这样考虑到散射向量且导入误差项来对重复解进行改良,从而能够提高应力值的精度。

[0030] 根据本发明,通过考虑到散射向量且导入误差项来改良重复解,从而能够提高应力值的精度。

附图说明

[0031] 图1是表示本发明的应力解析系统的简图。

[0032] 图2是表示X射线衍射装置以及德拜-谢乐环的示意图。

[0033] 图3A、3B分别是表示应变时的德拜-谢乐环的变形的图、表示峰值位置的变化图形。

[0034] 图4是表示应力解析装置的功能性结构的框图。

[0035] 图5是表示应力解析装置的动作的流程图。

[0036] 图6是以试样表面上的欧拉角 Φ 、 Ψ 表示散射向量的示意图。

[0037] 图7A是绘制了德拜-谢乐环的峰值位置的图形,图7B是表示原始数据和理论值的应力值的对比的表。

[0038] -符号说明-

[0039] 10 应力解析系统

[0040] 50 X射线衍射装置

[0041] 53 针孔准直仪

[0042] 55 检测部

[0043] 75a、75b 德拜-谢乐环

[0044] 100 应力解析装置

[0045] 110 图像蓄积部

[0046] 120 峰值位置决定部

[0047] 130 散射向量计算部

[0048] 140 操作部

[0049] 150 常数计算部

[0050] 160 解析部

[0051] 170 暂定值补正部

[0052] 180 控制部

[0053] 190 输出部

[0054] 71 入射X射线

[0055] 73 衍射X射线

[0056] 75 德拜-谢乐环

[0057] 80 积分范围

具体实施方式

[0058] 以下,参考附图来说明本发明的实施方式。为了易于说明的理解,在各附图中针对相同的结构要素赋予相同的参照编号,并省略重复的说明。

[0059] [应力解析系统的结构]

[0060] 图1是表示应力解析系统10的简图。应力解析系统10由X射线衍射装置50以及应力解析装置100构成,能够在X射线衍射装置50与应力解析装置100之间进行数据的收发。此外,优选X射线衍射装置50与应力解析装置100之间可通信地连接,但也可以利用存储介质来转移数据。

[0061] [X射线衍射装置的结构]

[0062] X射线衍射装置50具备:X射线产生部、针孔准直仪53以及检测部55。X射线发生部产生X射线,且朝向针孔准直仪53照射所产生的X射线。针孔准直仪53将所照射的X射线进行准直,照射到在无应变时具有各向同性的结构的试样的表面。通过针孔准直仪53而照射的X射线被试样S的特定晶格面衍射。此时,衍射X射线照射到以X射线照射点为顶点的圆锥状的区域。检测部55例如是二维半导体检测器,且设置在针孔准直仪53的两侧,对衍射X射线进行检测。

[0063] 图2是表示X射线衍射装置50以及德拜-谢乐环75的示意图。如图2所示,示出了:将X射线照射到试样S的表面时的坐标系、入射X射线71、衍射X射线73以及德拜-谢乐环75。将X射线束照射到试样S的特定部分,通过其衍射X射线,使德拜-谢乐环75在检测部55成像。此外, ϕ_0 试样S的表面的法线与入射X射线71所成的角。图中的 x_d 、 y_d 分别示出检测器55的表面上的坐标轴。

[0064] 图3A、图3B分别是表示应变时的德拜-谢乐环75的变形的图、表示衍射角 2θ 轮廓的峰值位置的变化图形。在使用德拜-谢乐环75的应力测量中,在被照射X射线的试样的特定部分存在应变的情况下,在从无应变时的正圆的德拜-谢乐环75a错开的位置处,产生基于试样的应变而变形的德拜-谢乐环75b。针对相同中心角 α 而言的积分范围80的衍射角 2θ 轮廓,德拜-谢乐环75a与德拜-谢乐环75b是不同的。能够用检测部55来检测该德拜-谢乐环75b。于是,对于所检测的德拜-谢乐环75b,能够作为测量值而得到 $d_{\phi\psi}$,作为计算值而计算出 ϕ 、 ψ ,因此,能够通过求解方程式来计算各应力值。

[0065] 图4是表示应力解析装置100的功能性结构的框图。如图4所示,应力解析装置100具备图像蓄积部110、峰值位置决定部120、散射向量计算部130、操作部140、常数计算部150、解析部160、暂定值补正部170、控制部180以及输出部190,根据所拍摄的德拜-谢乐环的数据来计算试样的残留应力。

[0066] 图像蓄积部110蓄积由X射线衍射装置50拍摄且输入到应力解析装置100的德拜-谢乐环的图像数据。峰值位置决定部120根据峰值的强度分布等来决定针对德拜-谢乐环的各 α 的成为峰值位置的 2θ 。散射向量计算部130计算出欧拉角 ϕ 、 ψ ,以作为与针对 α 的各峰值位置 2θ 对应的散射向量。

[0067] 操作部140例如为键盘、触摸面板等,用于接受用户的输入。用户能够通过操作部140来输入后述的循环处理的结束条件、暂定值的初始值、试样的特性值等。常数计算部150利用由试样的材质决定的杨氏模量、泊松比来计算后述的公式(5)中的常数 S_1 、 S_2 。

[0068] 解析部160在与试样S的表面垂直的方向的应力为恒定时,采用包含误差的项且表示应力与应变的关系的方程式,利用基于针对多个散射向量的衍射X射线的测量值和暂定值,将误差作为解之一来计算。具体而言,能够利用不同的 φ 、 ψ 下的衍射X射线来测量 $d_{\varphi\psi}$,并根据这些值,将后述的公式(9)作为观测方程式来求取 σ_{ij} ($i, j=1, 2$)。解析部160优选例如采用最小自乘法来计算观测方程式的解。由此,根据观测方程式就能够容易地计算出误差、应力。

[0069] 暂定值补正部170利用所计算出的误差来补正暂定值。暂定值补正部170优选通过使晶格面间距的误差率近似为等于将正负反转后的应变的误差来补正暂定值。由此,能够容易地补正晶格面间距的暂定值。

[0070] 控制部180直至满足给定的条件为止,使解析部以及补正部反复进行误差的计算以及暂定值的补正。通过这样考虑到散射向量且导入误差项来改良重复解,从而能够提高应力值的精度。此外,即使结晶粒径变得粗大而产生数据的缺损,也能够获得解析结果。给定的条件可列举例如:误差变得小于给定的数值。输出部190将作为所述反复的处理结束且最终得到的方程式的解而得到的各应力值作为解析结果来输出。能够通过这样排除误差来获得各应力值。

[0071] [应力解析装置的动作]

[0072] 对如上所述构成的应力解析装置100的动作的一例进行说明。图5是表示应力解析装置100的动作的流程图。此外,在以下的说明中,为了易于理解而采用了后述的公式(10)等中所包含的符号。

[0073] 首先,读入用X射线衍射装置50进行拍摄且在应力解析装置100中所蓄积的德拜-谢乐环的图像数据(步骤S1)。接下来,根据图像数据来决定德拜-谢乐环的峰值位置(步骤S2),且根据峰值位置来计算散射向量 φ 、 ψ ,并计算常数 S_1 、 S_2 以及暂定值 $d_{0(k)}$,以生成DRS(Direct Refinement Solution)法的方程式(步骤S3)。对所生成的方程式进行解析,以计算出解(步骤S4)。

[0074] 然后,判定误差 $\Delta \varepsilon_{(k)}$ 是否满足给定的条件(步骤S5),在误差 $\Delta \varepsilon_{(k)}$ 不满足条件的情况下,对暂定值 $d_{0(k)}$ 进行补正(步骤S6),返回步骤S4。在误差 $\Delta \varepsilon_{(k)}$ 满足了条件的情况下,输出应力值 $\sigma_{ij(k)}$ (步骤S7),并结束处理。

[0075] [原理]

[0076] 接下来,对计算应力的原理进行说明。图6是以试样表面上的欧拉角 φ 、 ψ 表示散射向量的示意图。在装置坐标系中,从以欧拉(Euler)角 φ 、 ψ 表示的方位看到的垂直应变 $\varepsilon_{\varphi\psi}$ 与在装置坐标轴上的垂直应力 σ_{11} 、 σ_{22} 、 σ_{33} 、剪切应力 σ_{23} 、 σ_{13} 、 σ_{12} 的关系,如下所示。

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\varphi\psi} = & \frac{1}{2} S_2 \{ (\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{12} \sin 2\varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi) \sin^2 \psi \\ & + (\sigma_{13} \cos \varphi + \sigma_{23} \sin \varphi) \sin 2\psi + \sigma_{33} \cos^2 \psi \} \quad \dots (5) \\ & + S_1 (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) \end{aligned}$$

[0078] 此处, S_1 、 S_2 是被称为X射线的弹性可塑性的常数, 使用杨氏模量 (Young' s modulus) E 和泊松比 ν (Poisson' s ratio) 表示如下。

$$[0079] \quad S_1 = -\frac{\nu}{E} \quad \dots (6)$$

$$[0080] \quad \frac{1}{2}S_2 = \frac{1+\nu}{E} \quad \dots (7)$$

[0081] 另一方面, 若采用X射线衍射, 则能够测量晶格面间距。若将在以X射线的散射向量的朝向, 即成为测量对象的晶格面的法线的朝向成为 Φ 、 Ψ 的方式配置的光学系统中测量的晶格面间距设为 $d_{\Phi\Psi}$, 且将无应变状态下的晶格面间距设为 d_0 , 则 Φ 、 Ψ 方向的应变 $\varepsilon_{\Phi\Psi}$ 用 $d_{\Phi\Psi}$ 、 d_0 表示如下。

$$[0082] \quad \varepsilon_{\Phi\Psi} = \frac{d_{\Phi\Psi} - d_0}{d_0} \quad \dots (8)$$

[0083] 由于 d_0 是材料固有的值, 因此, 若根据所述 (5)、(6), 在不同的6组以上的 Φ 、 Ψ 中测量晶格面间距, 则理论上能够求取应力 σ_{11} 、 σ_{22} 、 σ_{33} 以及 σ_{23} 、 σ_{13} 、 σ_{12} 。

[0084] 但是, 实际上, 由于 d_0 随着结晶的状态而容易变化, 因此, 针对所有试样事先无法获知正确的 d_0 , 若直接利用所赋予的 d_0 和公式 (5) 来进行应力的计算, 则计算结果有时会有较大的误差。此外, 无法求解基于以7组以上的 Φ 、 Ψ 测量的晶格面间距的值而生成的将 d_0 也设为变量的非线性联立方程式。为此, 在以往的应力解析方法中, 采用了避免这种误差的计算方法。

[0085] 虽然若采用这些解析方法, 则能够避免因 d_0 的误差而引起的较大的误差, 但是, 还是会残留因各种解析方法所采用的表示应变与应力的关系的模型而引起的误差。在作为本实施方式而说明的应力解析方法的“DRS法”中, 通过以下所列举的 [1]、[2], 能够获得比以往解析方法精度更高的计算结果。

[0086] [1] 直接使用最忠实表示公式 (5) 中所示的各向同性弹性体的应变与应力的关系的模型。

[0087] [2] 求解将应力与 d_0 两者设为变量的非线性方程式, 完全排除因 d_0 的误差而引起的应力计算值的误差。

[0088] 在DRS法中, 为了提高计算精度, 而采用最忠实表示各向同性弹性体中的应力与应变的关系的公式 (5) 来进行应力的计算。不过, 为了排除因 d_0 的误差而引起的应力计算值的误差, 而将 d_0 设为变量来计算 σ_{33} 以外的应力。此时, 不采用要求解的初始值的Newton法等一般非线性方程式, 而采用接下来的利用了问题的构造的特征的更高效的方法。此外, 若如上所述那样固定 σ_{33} 则能够将 d_0 设为变量来求解方程式的理由, 在后面叙述。

[0089] 根据公式 (5)、(8), 建立关注于晶格面间距的如下的方程式。此处, 由于将 $d_{0(k)}$ 设为常数, 因此该方程式为线性。此外, σ_{33} 设为常数。例如, 设为 $\sigma_{33} = 0$ 。 $\Delta \varepsilon_{(k)}$ 是表示由 d_0 的暂定值 $d_{0(k)}$ 的误差而产生的应变的观测值的误差的项。

$$[0090] \quad d_{\Phi\Psi} = d_{0(k)} \{ \varepsilon_{\Phi\Psi}(\sigma_{ij(k)}) + \Delta \varepsilon_{(k)} + 1 \} \quad \dots (9)$$

[0091] 具体而言,能够表示为公式(10)。

$$d_{\phi\psi} = d_{0(k)} \left\{ \frac{1}{2} S_2 (\sigma_{11(k)} + \sigma_{12(k)} \sin 2\phi + \xi_{22(k)} \sin^2 \phi) \sin^2 \psi + S_1 (2\sigma_{11(k)} + \xi_{22(k)}) + \Delta \varepsilon_{(k)} + 1 \right\}$$

[0092]

$$\begin{aligned} d_{\phi\psi} &= d_0 (\varepsilon_{\phi\psi} + 1) \\ \cos^2 \phi &= 1 - \sin^2 \phi \end{aligned} \quad \dots (10)$$

[0093] $\xi_{22} \equiv \sigma_{22} - \sigma_{11}$

[0094] 虽然从对其求解而得到的应力 $\sigma_{ij(k)}$ 中排除了因 d_0 的误差而引起的较大的误差,但是,若它极其接近于真值,则成为 $\Delta \varepsilon_{(k)} = 0$ 。在并非如此的情况下, $d_{0(k)}$ 仍然包含有无法忽视的误差,使用它来计算得到的 $\sigma_{ij(k)}$ 也同样包含有误差。根据后述的公式(13)以及公式(14),而为 $\Delta \varepsilon_{(k)} \approx -\Delta_{(k)}$,因此,若如下求出 $d_{0(k+1)}$,且使用它来计算 $\sigma_{ij(k+1)}$ 、 $\Delta \varepsilon_{(k+1)}$,则 $\sigma_{ij(k+1)}$ 更接近于真值, $\Delta \varepsilon_{(k+1)}$ 更接近于0。若直至 $\Delta \varepsilon_{(k+1)}$ 足够接近于0为止,反复进行该操作,则 $\sigma_{ij(k+1)}$ 收敛于真值。

[0095] [误差项]

[0096] 若采用包含误差的无应变状态下的晶格面间距 $d_{0(k)}$ 来计算应力,则得到的值中也包含误差。因此,将 $d_{0(k)}$ 定义为如公式(11)那样,利用该关系来改良 $d_{0(k)}$ 的值,以提高应力的计算精度。

[0097] $d_{0(k)} = d_0 (1 + \Delta_{(k)}) \dots (11)$

[0098] 此外,将根据 $d_{0(k)}$ 和 $d_{\phi\psi}$ 而使用公式(5)计算出的包含误差的应变 $\varepsilon_{\phi\psi}(k)$ 定义为如公式(12)那样。

[0099] $\varepsilon_{\phi\psi}(k) = \varepsilon_{\phi\psi} + \Delta \varepsilon \dots (12)$

[0100] 根据公式(11)(12),进行如下计算,能够计算出 $d_{0(k+1)}$ 。

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\phi\psi}(k) &= \frac{d_{\phi\psi} - d_{0(k)}}{d_{0(k)}} \\ \varepsilon_{\phi\psi} + \Delta \varepsilon(k) &= \frac{d_{\phi\psi}}{d_0 (1 + \Delta_{(k)})} - 1 \end{aligned} \quad \dots (13)$$

$$\begin{aligned} &\cong \frac{d_{\phi\psi}}{d_0} (1 - \Delta_{(k)}) - 1 \\ \therefore \Delta \varepsilon(k) &\cong -\frac{d_{\phi\psi}}{d_0} \Delta_{(k)} \\ &\cong -\Delta_{(k)} \end{aligned} \quad \dots (14)$$

$$d_{0(k+1)} = \frac{d_{0(k)}}{1 - \Delta \varepsilon_k} \quad \dots (15)$$

[0104] 由于 $\varepsilon_{\varphi\psi}$ 是 10^{-3} 以下的值, 所以, 即使例如 Δ 为 10^{-2} 左右, $\Delta\varepsilon$ 也成为 $\varepsilon_{\varphi\psi}$ 的数倍的值。因此, 由包含这种误差的应变计算的应力的误差也还会包含真值的数倍的误差。通过将 σ_{33} 的值固定, 求解公式 (10) 的非线性方程式, 求出残留的应力和误差项 $\Delta\varepsilon$, 使用公式 (15) 来求取 $d_{0(k+1)}$, 能够避免这种误差。通过使用比 $d_{0(k)}$ 更接近 d_0 的 $d_{0(k+1)}$ 来求解方程式, 由此能够改良应力值的精度。

[0105] [若将 σ_{33} 固定则能够将 d_0 设为变量来求解方程式的理由]

[0106] 由公式 (5) 也将 d_0 设为变量而导出的以下的非线性方程式 (16), 利用求取其解的修正值的线性方程式, 使 d_0 的系数成为其他变量的系数的线性代数与常数之和。

$$[0107] \quad d_{\varphi\psi} = d_0 \left[\frac{1}{2} S_2 \{ (\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{12} \sin 2\varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi) \sin^2 \psi \right. \\ \left. + (\sigma_{13} \cos \varphi + \sigma_{23} \sin \varphi) \sin 2\psi + \sigma_{33} \cos^2 \psi \right] + S_1 (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) + 1 \quad \cdots (16)$$

[0108] 另一方面, 在该线性方程式的系数之间, 公式 (17) 的关系成立, 而与 φ 、 ψ 的值无关。

$$[0109] \quad \frac{\partial d_{\varphi\psi}}{\partial \sigma_{11}} + \frac{\partial d_{\varphi\psi}}{\partial \sigma_{22}} + \frac{\partial d_{\varphi\psi}}{\partial \sigma_{33}} = \frac{1}{2} S_2 + 3S_1 \quad \cdots (17)$$

[0110] 因此, 求取解的修正值的线性方程式的系数矩阵的列向量成为线性从属, 无法求解将所有应力和 d_0 两者设为变量的方程式。这在将 d_0 设为常数且导入 d_0 的误差项的线性方程式 (12) 中也同样。不过, 若将 σ_{33} 设为常数, 则公式 (17) 的关系不成立。因此, 能够求出残留的应力和 d_0 或者 d_0 的误差项。

[0111] [实施例]

[0112] (DRS法与 $\cos\alpha$ 法的比较)

[0113] 使用实际的德拜-谢乐环的拍摄数据, 利用 $\cos\alpha$ 法和本实施方式的方法 (DRS法) 进行了应力解析。图7A是在圆周角 α 以及衍射角 2θ 的坐标上, 描绘了所拍摄的德拜-谢乐环的峰值位置以及理论上的峰值位置的图形。图7B是对由原始数据计算出的应力值与由峰值位置的理论值再计算的应力值进行对比得到的表。此外, 峰值位置的理论值的计算方法在后面进行叙述。

[0114] 在图7A中, 在使用了实际的测量数据的计算的过程中得到的衍射X射线的峰值位置用“+”来表示。图7A的“×”的标记表示应力为所述的计算值 ($\sigma_{11} = -1757.8$, $\sigma_{12} = -47.9$, $\sigma_{22} = -1.3$) 时的理论上的峰值位置。

[0115] 在图7B中, “由原始数据计算”的行, 表示使用实际的测量数据而计算出的应力值。另一方面, 使用该理论上的峰值位置而计算出应力的值被记载于所述表的“由峰值位置的理论值再计算”的行。

[0116] 基于此结果可知: 采用“DRS法”, 根据理论上的峰值位置正确地计算出了原始的应力值 ($\sigma_{11} = -1757.8$, $\sigma_{12} = -47.9$, $\sigma_{22} = -1.3$), 相对于此, 采用 $\cos\alpha$ 法, 仅仅以2位左右的精度计算出了应力值为 ($\sigma_{11} = -1715.3$, $\sigma_{12} = -50.1$)。

[0117] (理论值的计算方法)

[0118] 峰值位置的理论值的计算通过以下的步骤[1]～[6]来进行。

[0119] [1]根据用DRS法计算出的无应变状态下的晶格面间距 d_0 与光学系统的配置、以及所赋予的德拜-谢乐环的圆周角 α ,计算该 α 中的无应变状态下的散射向量的欧拉角 $\Phi_{(k)}$ 、 $\Psi_{(k)}$ 。

[0120] [2]根据由所述计算而得到的 $\Phi_{(k)}$ 、 $\Psi_{(k)}$ 与 d_0 、以及所赋予的应力值,利用公式(5)、(8)来计算应该是在该欧拉角中观测的晶格面间距的暂定值 $d_{\Phi\Psi(k)}$ 。

[0121] [3]根据由所述的计算而得到的 $d_{\Phi\Psi(k)}$,与步骤[1]同样地计算欧拉角的改良值 $\Phi_{(k+1)}$ 、 $\Psi_{(k+1)}$ 。

[0122] [4]根据由所述的计算而得到的 $\Phi_{(k+1)}$ 、 $\Psi_{(k+1)}$,与步骤[2]同样地计算晶格面间距的改良值 $d_{\Phi\Psi(k+1)}$ 。

[0123] [5]直至 $|d_{\Phi\Psi(k)} - d_{\Phi\Psi(k+1)}|$ 成为例如 10^{-8} 以下为止,反复进行所述步骤[3]、[4]。

[0124] [6]根据最终得到的晶格面间 $d_{\Phi\Psi(k+n)}$,计算所赋予的 α 中的衍射角 $2\theta_{\Phi\Psi}$ 。

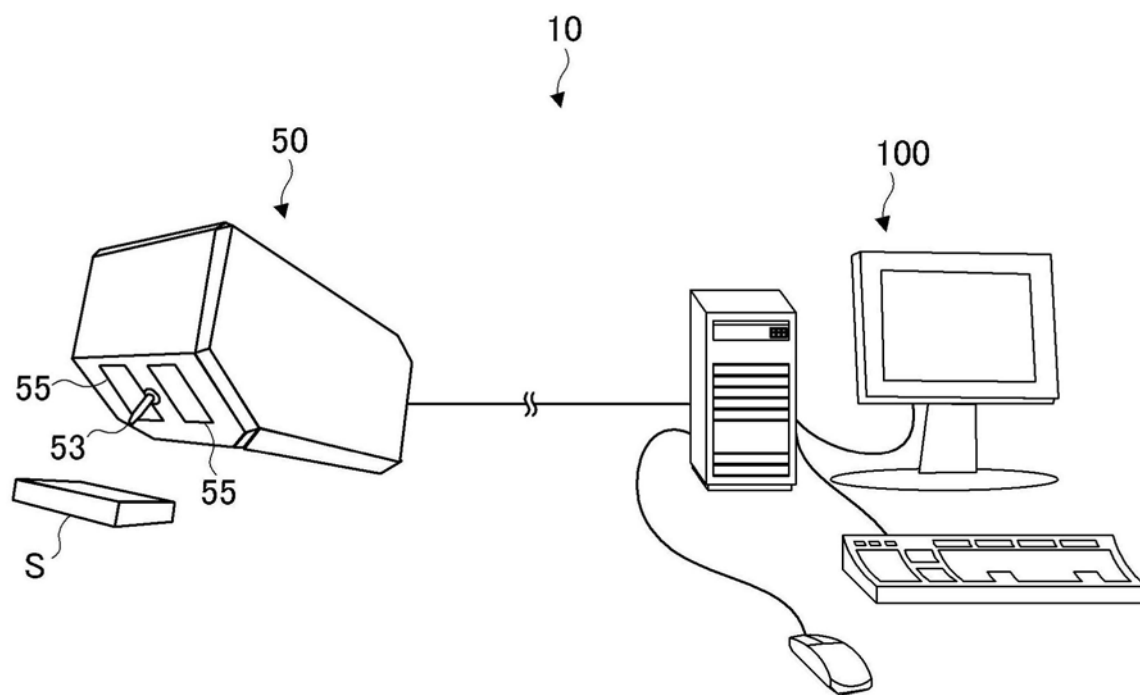


图1

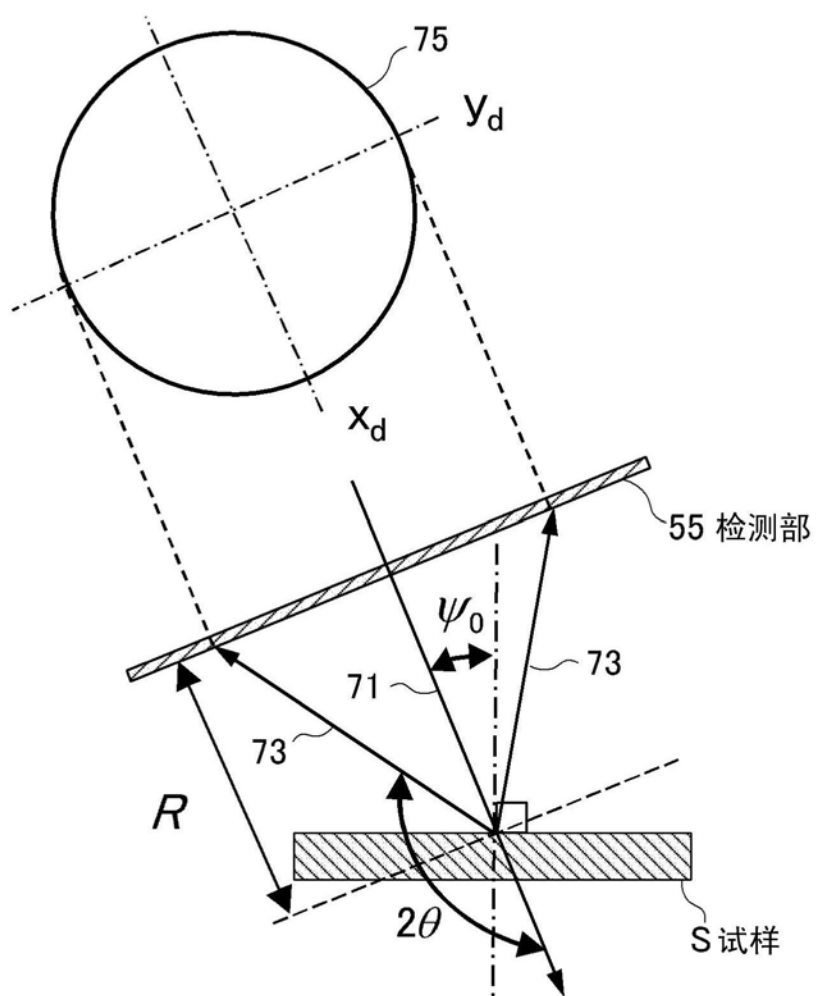


图2

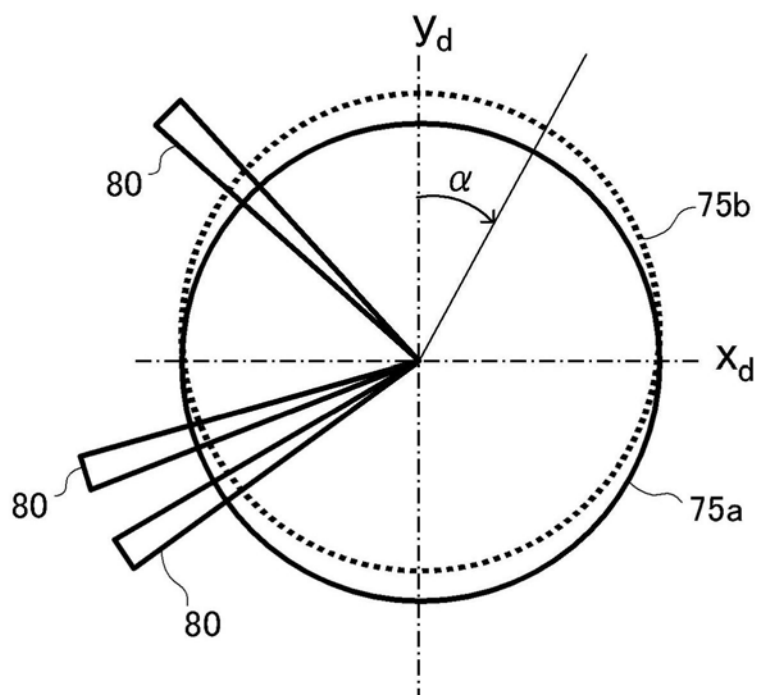


图3A

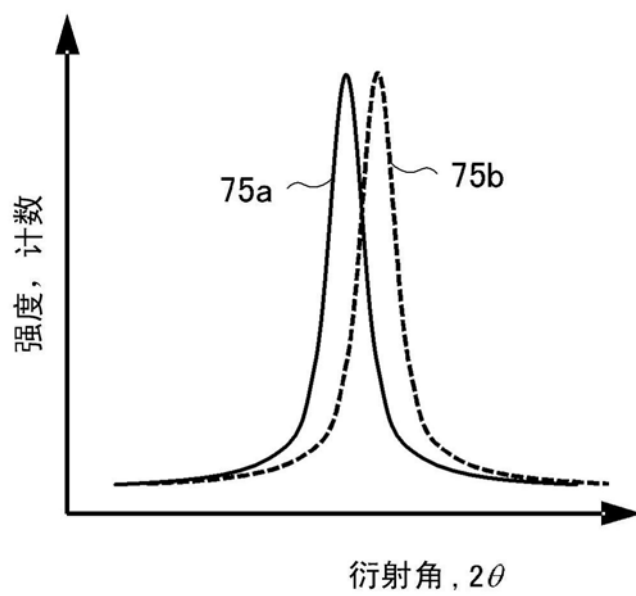


图3B

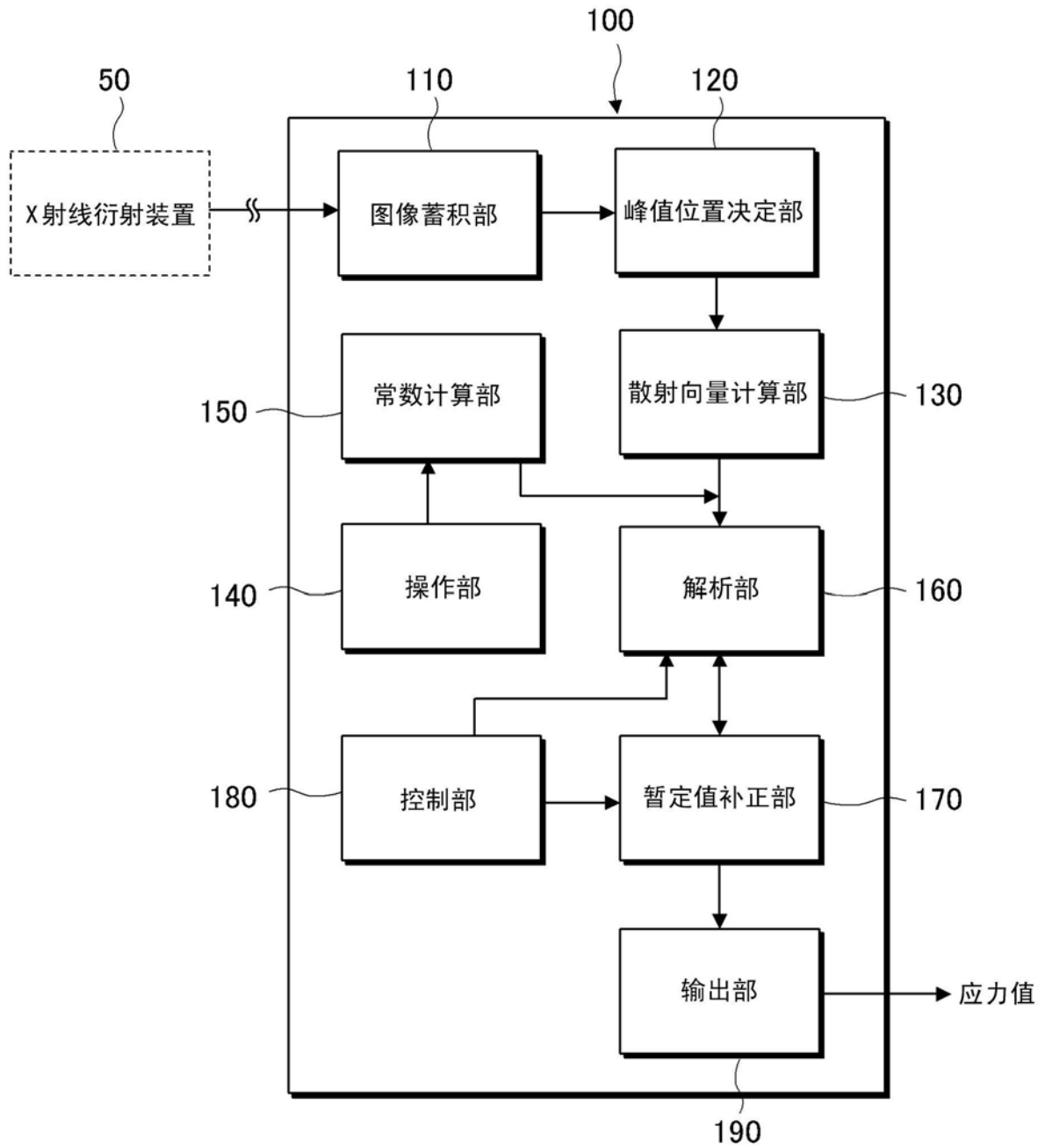


图4

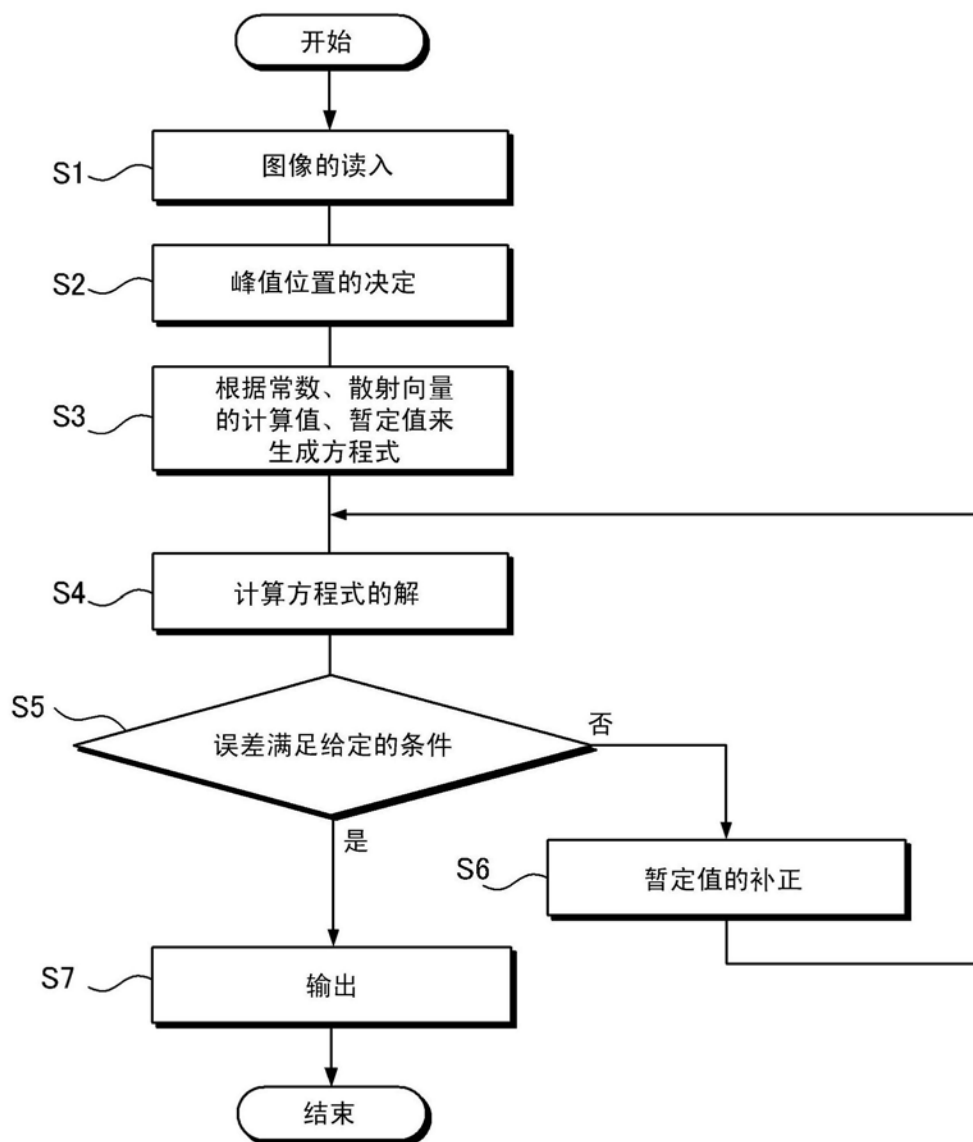


图5

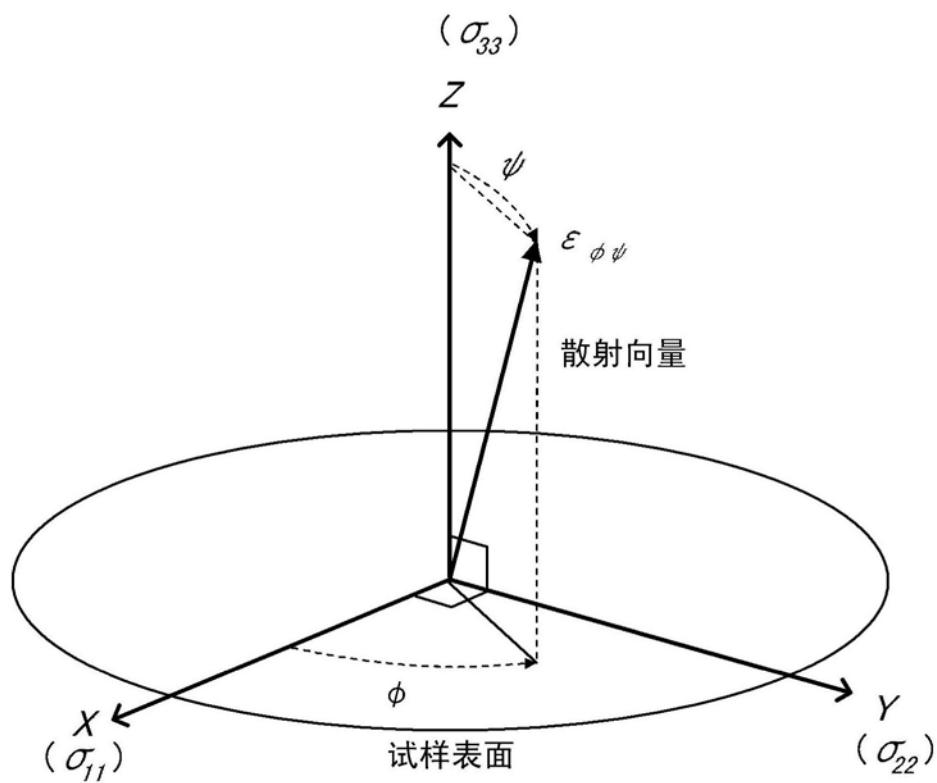


图6

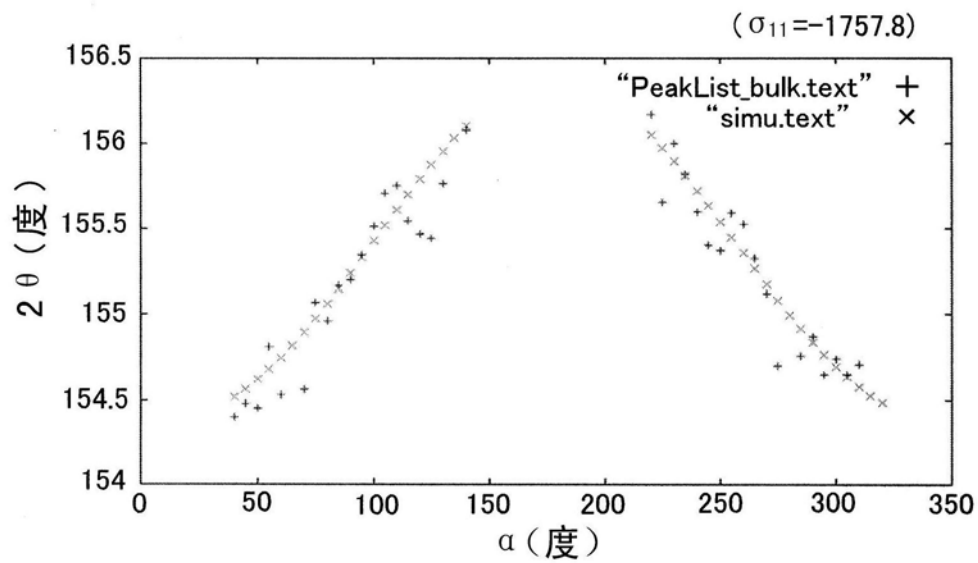


图7A

	DSR法						$\cos \alpha$ 法	
	σ_{11}		σ_{12}		σ_{22}		σ_{11}	σ_{12}
	应力值	ESD	应力值	ESD	应力值	ESD	应力值	应力值
由原始数据计算	-1757.8	117.5	-47.9	49.8	-1.3	117.5	-	-
由峰值位置的理论值再计算	-1757.8	0.0	-47.9	0.0	-1.3	0.0	-1715.3	-50.1

图7B