

C u b i cファイバー解析に関して

Fiber 状態での VolumeFraction 計算では、基本は面配向である。
軸配向の場合、軸配向→面配向で基本の面配向として計算出来ます。

しかし、 β -Fiber では3次元的な連続方位と考えると2次元の面配向には変換出来ません。
B r a s s - S - C o p p e r の間に仮の結晶方位を内挿して連続的にします。
この内挿方法で上記軸配向も計算出来ます。

2014年11月05日

HelperTex Office

山田 義行

Fiber

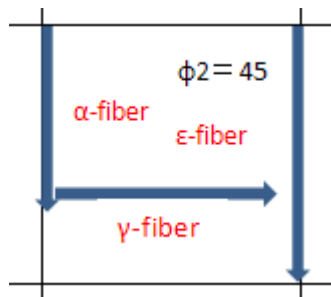
Fiberとは、結晶方位が連続的に続いている状態で、面配向や軸配向の2次的に続いている状態や、 β ファイバーのような3次的に続いている状態を表現しています。

ODFDisplay 説明書 BCC-Fiber や、FCC-Fiber で説明しています。

面配向、軸配向

BCC のファイバーでは $\phi 2 = 45$ 度に多くの Fiber が現れます。

BCC $\phi 2=45$



α -fiber は、 $\langle 110 \rangle // RD$ として表現され、 $(001)[1-10]$, $(225)[1-10]$, $(112)[1-10]$, $(111)[1-10]$ などが含まれる **軸配向**です。

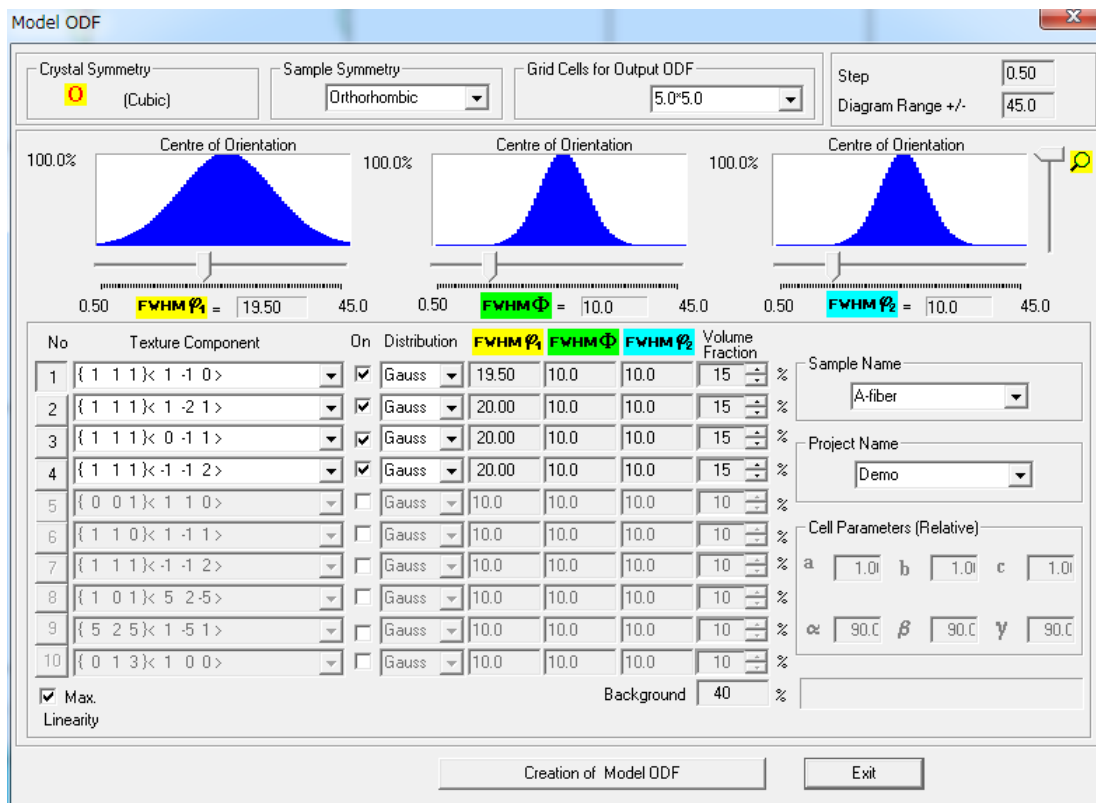
γ -Fiber は、 $\{111\} // ND$ として表現され、 $(111)[1-10]$, $(111)[1-21]$, $(111)[0-11]$, $(111)[-1-12]$ などが含まれる **面配向**です。

ε -Fiber は、 $\langle 011 \rangle // TD$ として表現され、 $(001)[-1-10]$, $(114)[-2-21]$, $(112)[-1-11]$, $(111)[-1-12]$, $(332)[-1-13]$, $(110)[001]$ などが含まれる **軸配向**です。

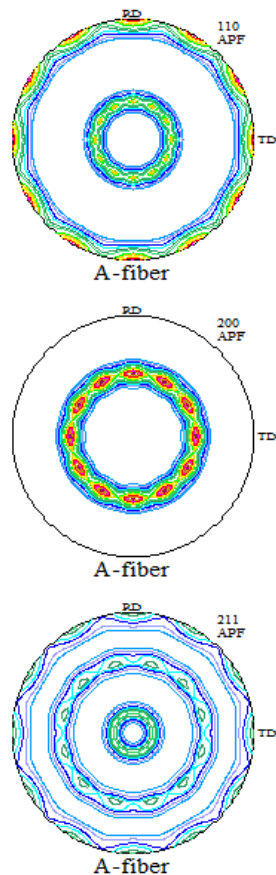
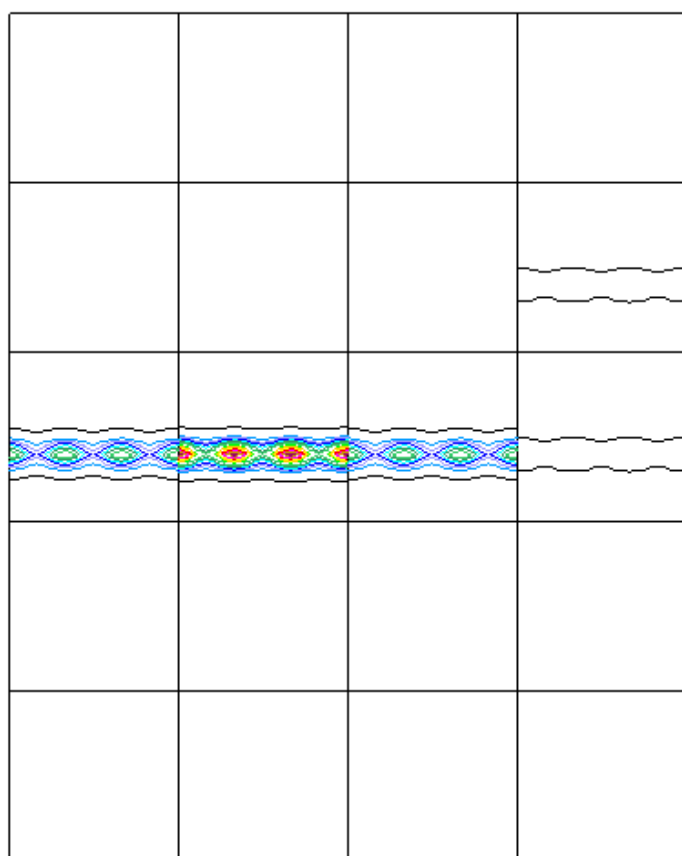
いずれも、2次元で表現されます。

面配向の VolumeFraction

例 γ -fiber(111)[1-10], (111)[1-21], (111)[0-11], (111)[-1-12]が15%含まれるとします。



ODF図は

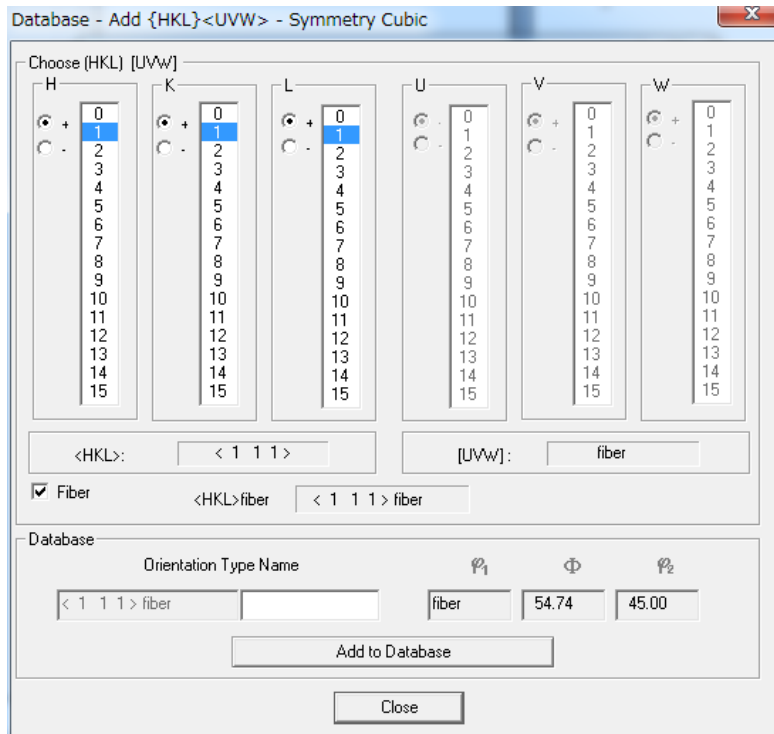


面配向の場合、極点図に円が現れます。

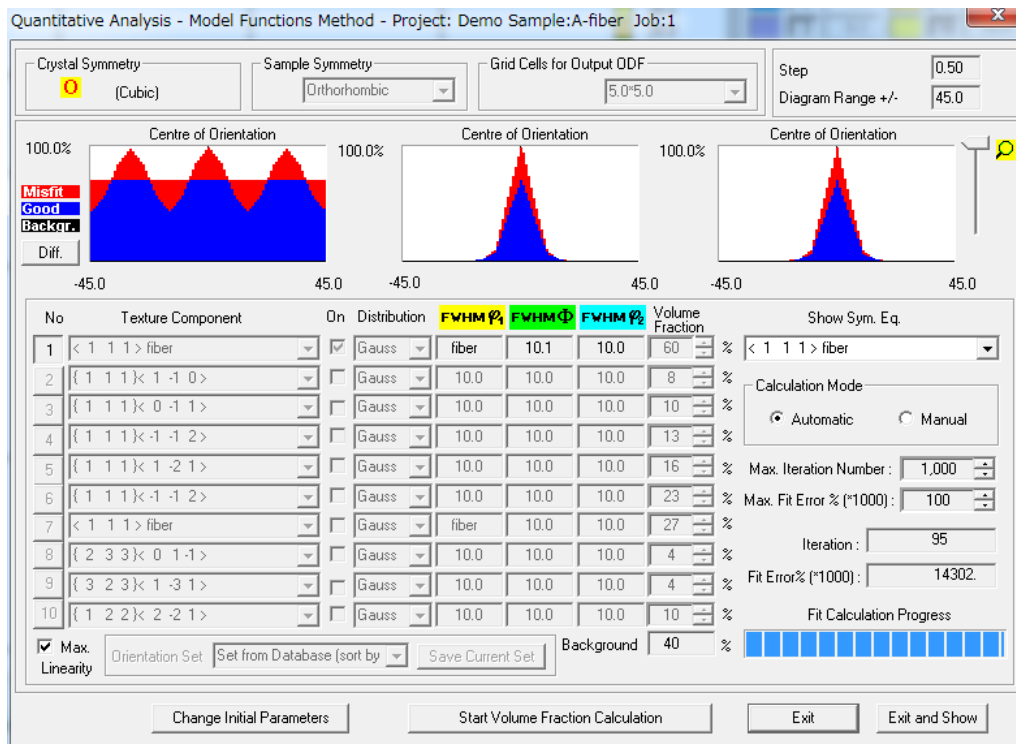
4個の結晶方位なので凸凹しています。本来は連続的な方位になります。

面配向の VolumeFraction

{111}//ND をデータベースに登録



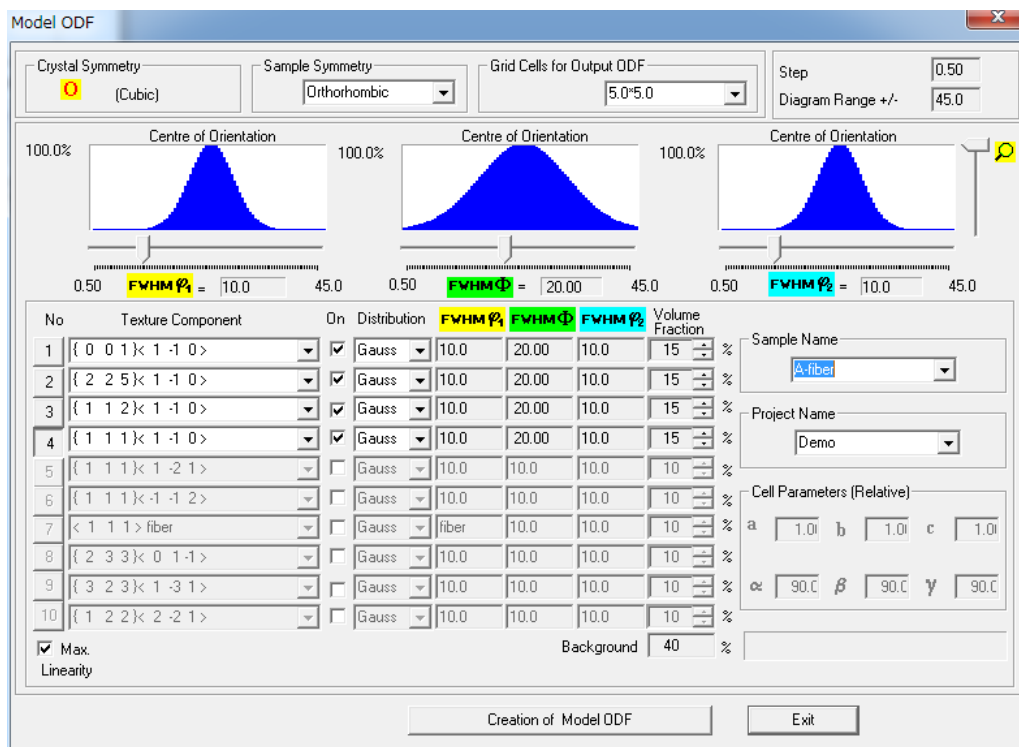
<111>Fiber として VolumeFraction を求める



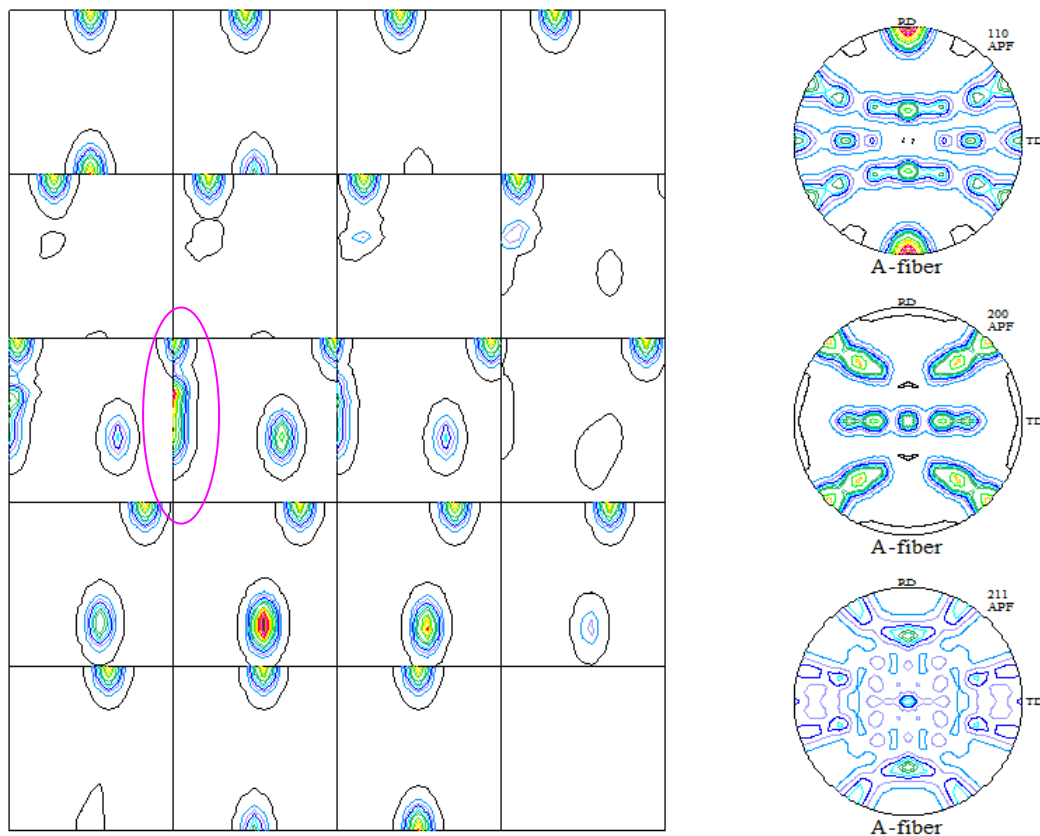
60%として、求められます。

軸配向の VolumeFraction

例 α -fiber(001)[1-10], (225)[1-10], (112)[1-10], (111)[1-10]を15%を考える。

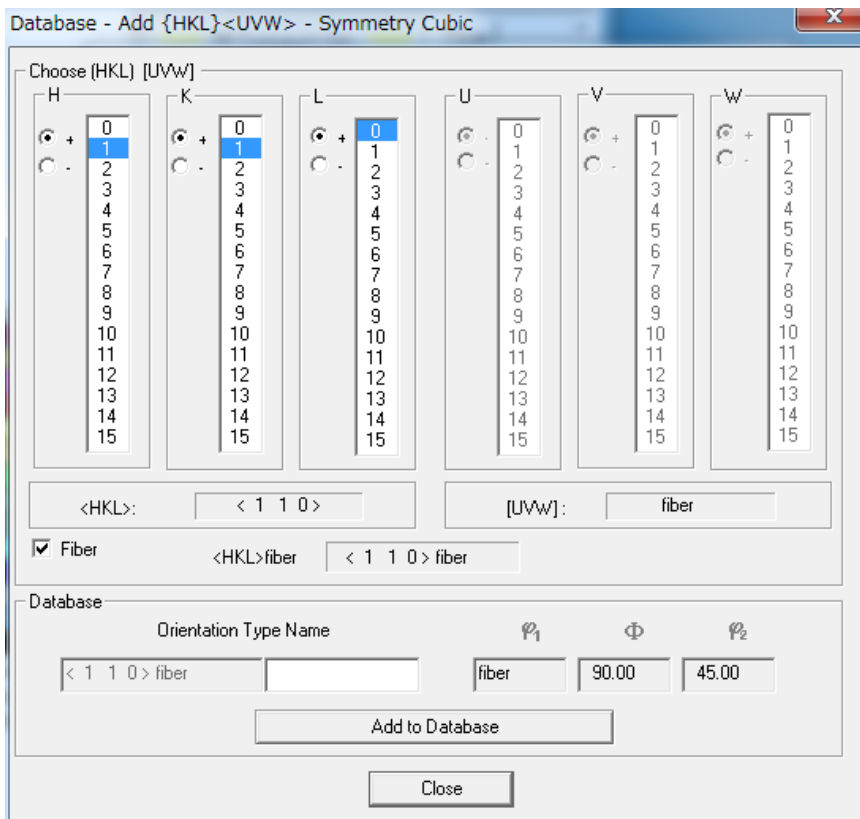


<110>//RD として ODF 図、再計算極点図を得ます。

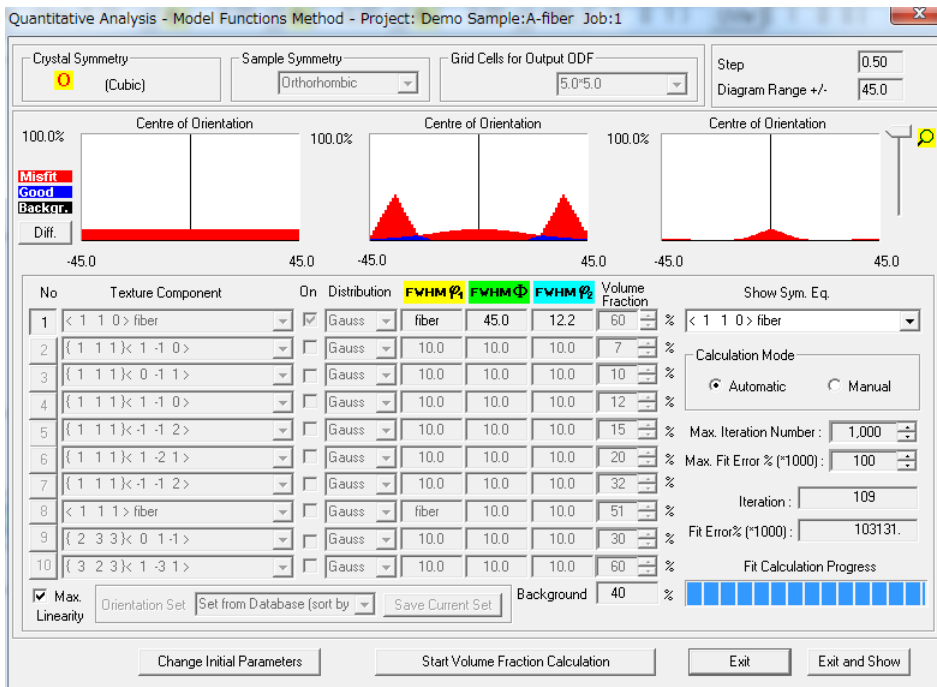


軸配向の場合、RD に対し、円弧になります。

<110>//RD の VolumeFraction



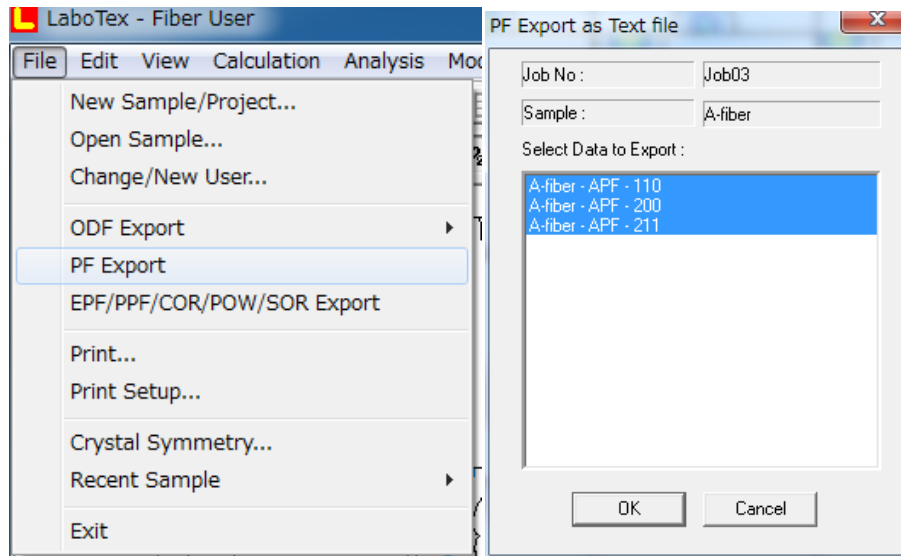
<110>Fiber として VolumeFraction を得ます。



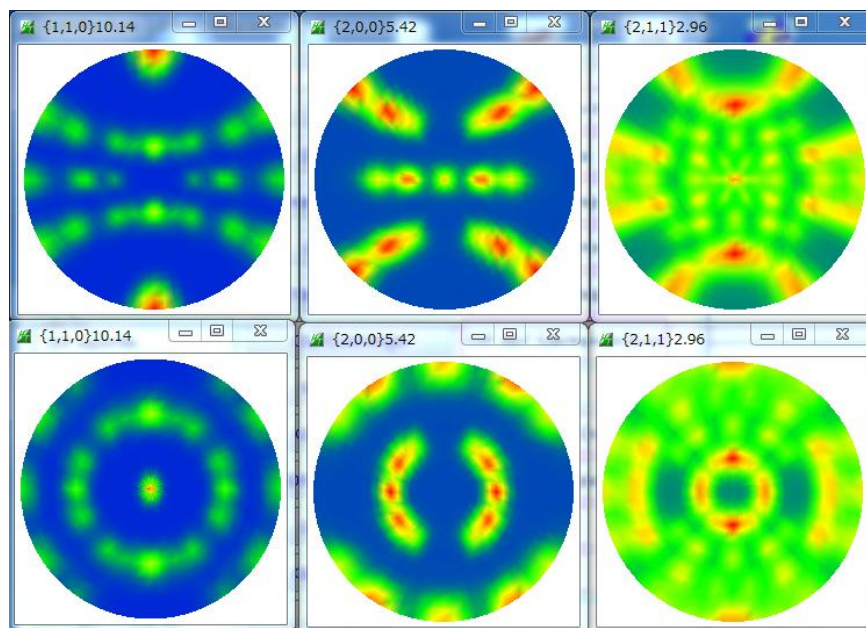
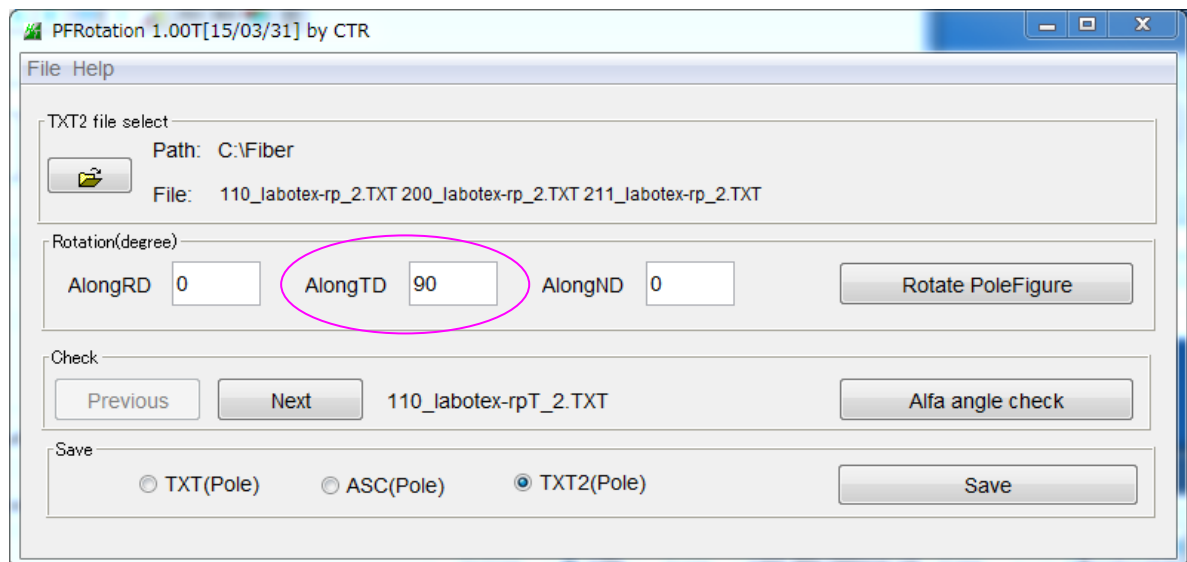
60%が求められます。

<110>//RD の VolumeFraction

完全極点図を Export し、極点図を TD 回転し、軸配向から面配向にして VolumeFraction を計算する。



極点図の TD 軸回転

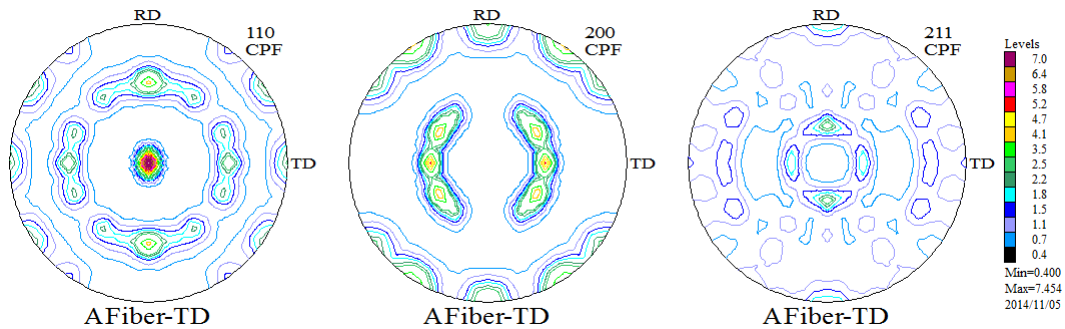


入力データ軸配向

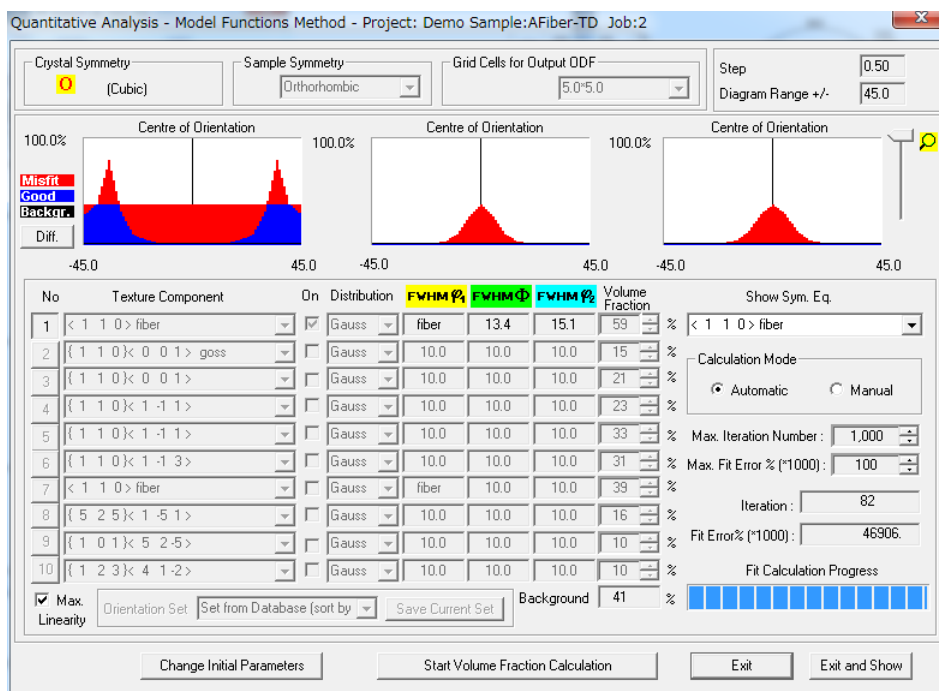
TD 軸回転で面配向へ

軸配向→TD回転→面配向、L a b o T e x で VolumeFraction

入力極点図

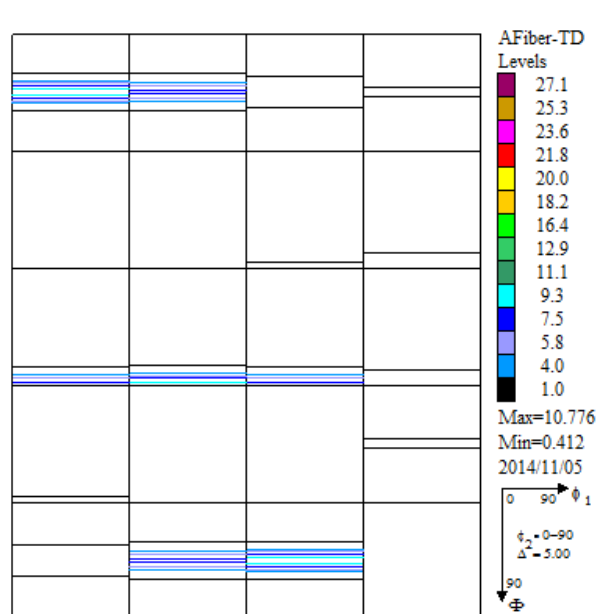
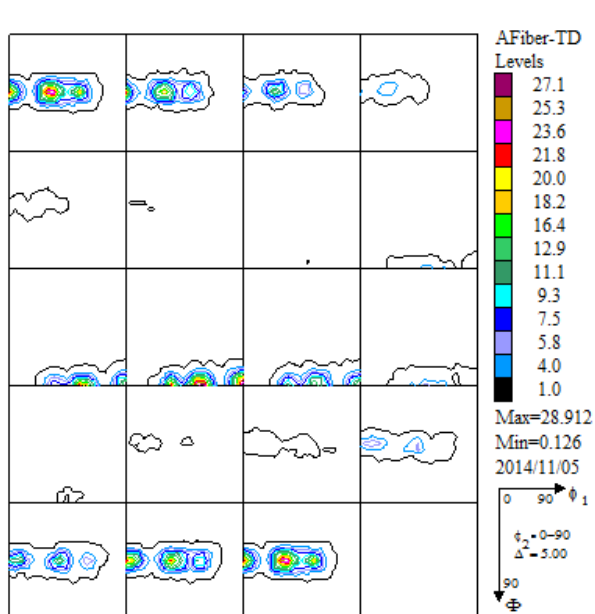


ODF 解析結果



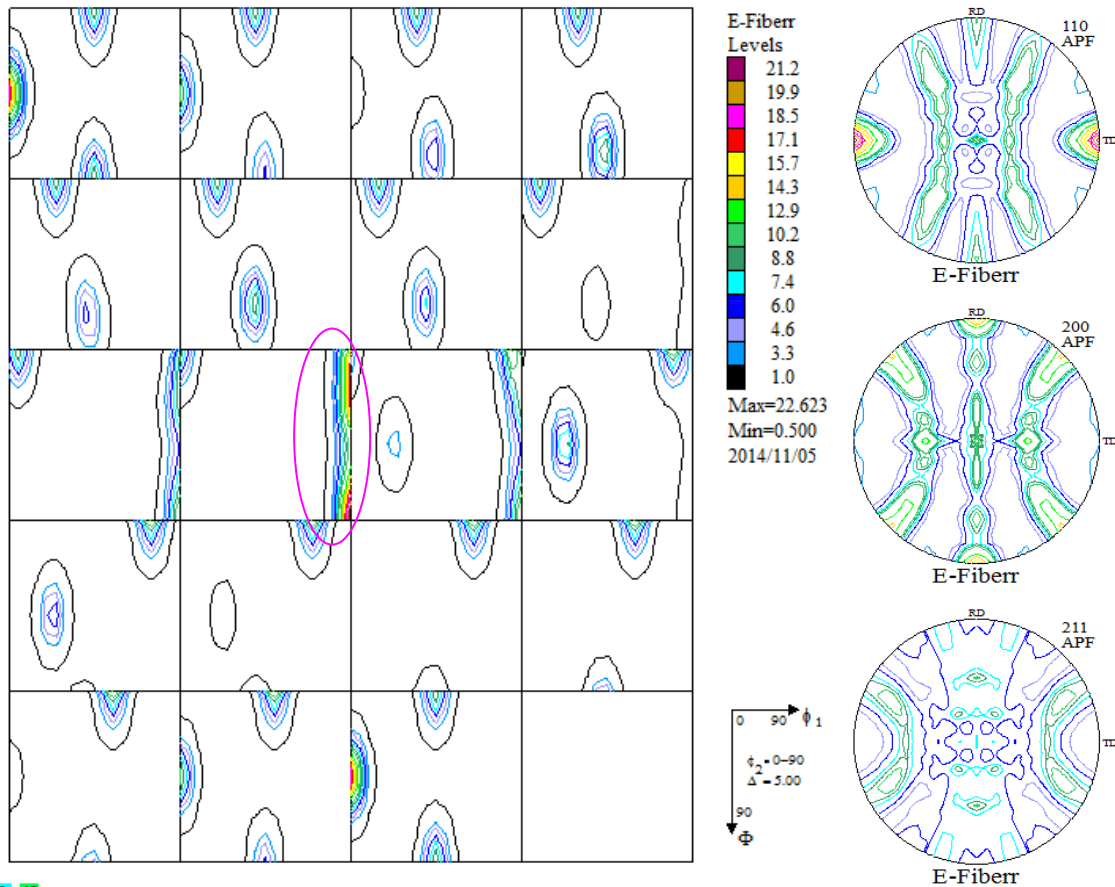
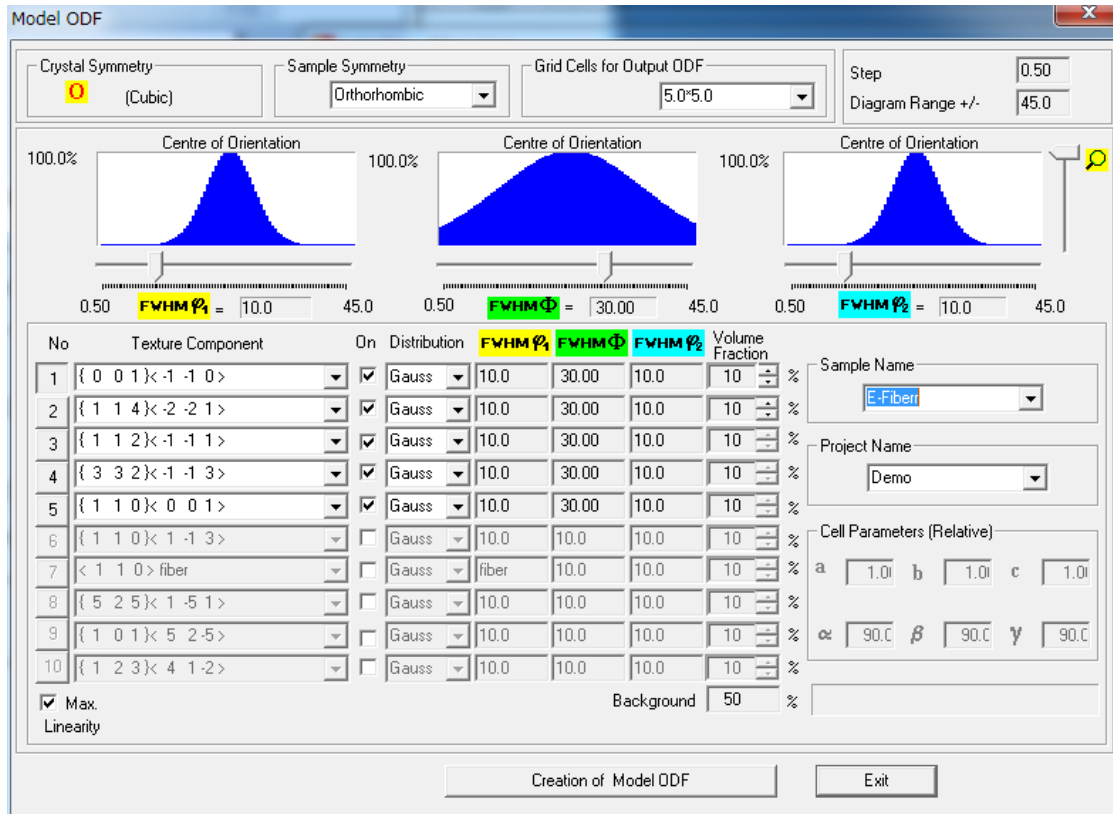
入力極点図から計算した ODF

VolumeFraction から計算した ODF 図



<011>//TD の ValueFraction

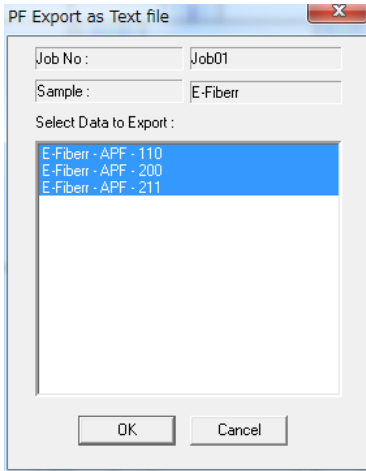
例 ε-Fiber (001)[-1-10],(114)[-2-21],(112)[-1-11],(111)[-1-12],(332)[-1-13], (110)[001]を 1 0 %



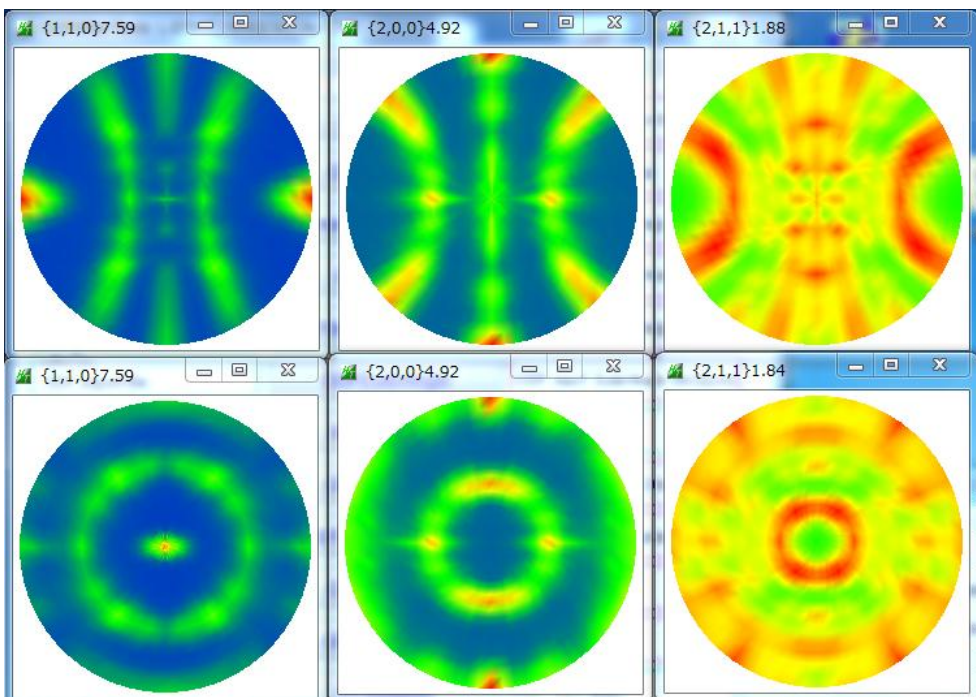
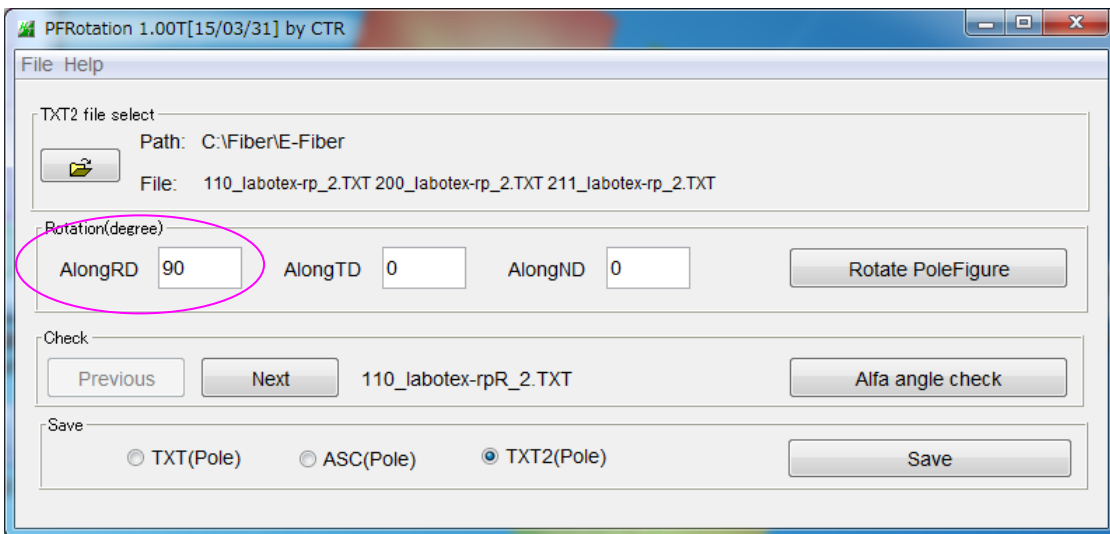
極点図がTD方向に対し円弧になる。

ϵ -Fiber の VolumeFraction

PF-Export->軸配向から RD 軸変換->面配向へ



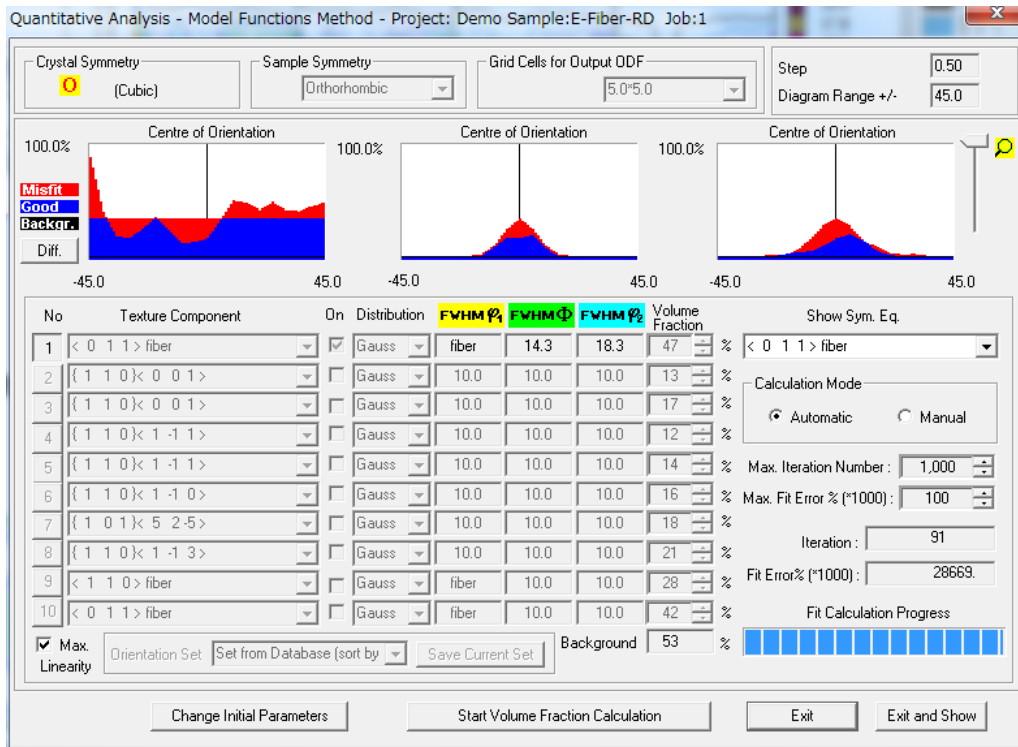
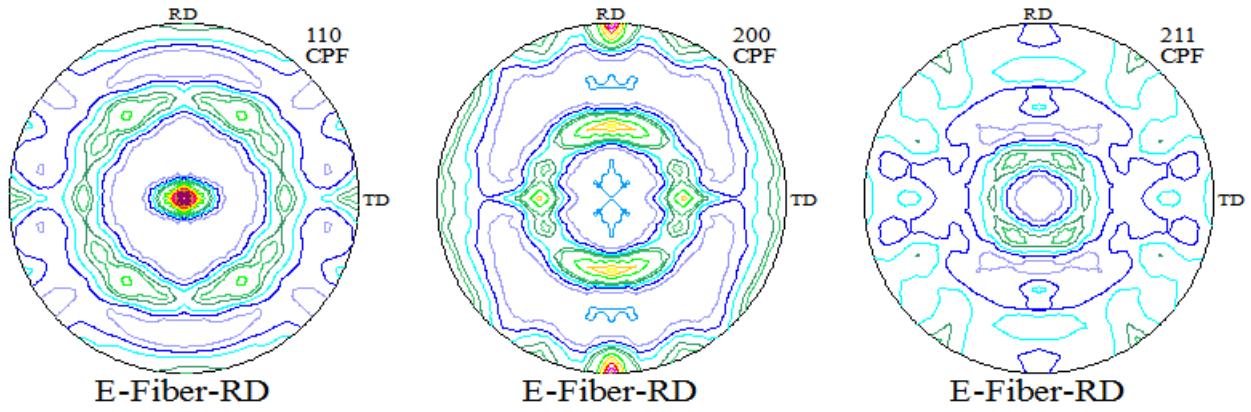
極点図の RD 軸回転



入力データ軸配向

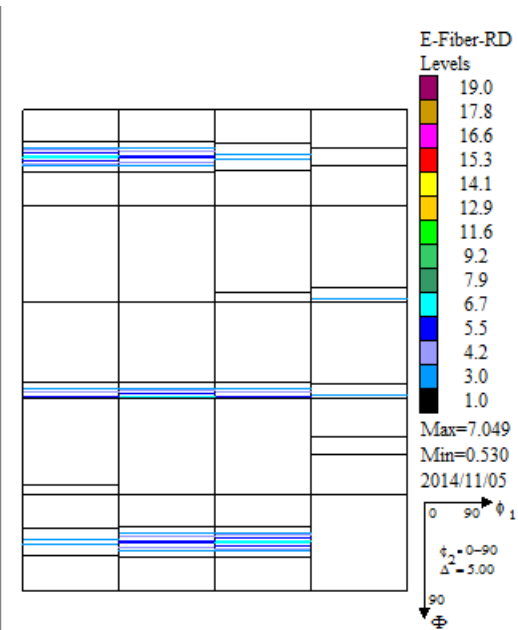
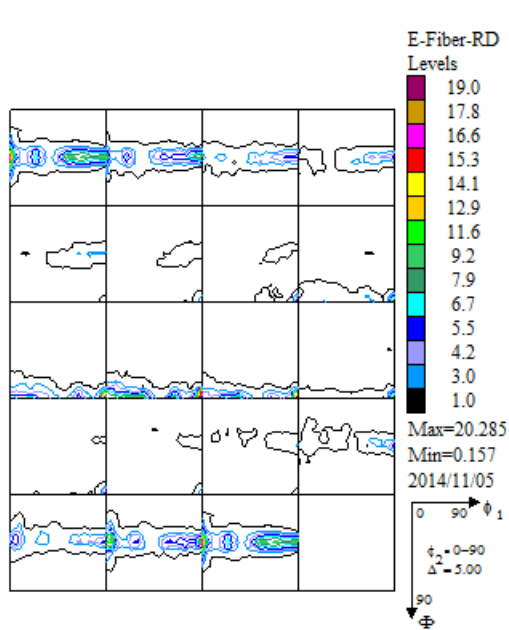
RD 軸回転で面配向へ

<011>//TD の VolumeFraction を求める



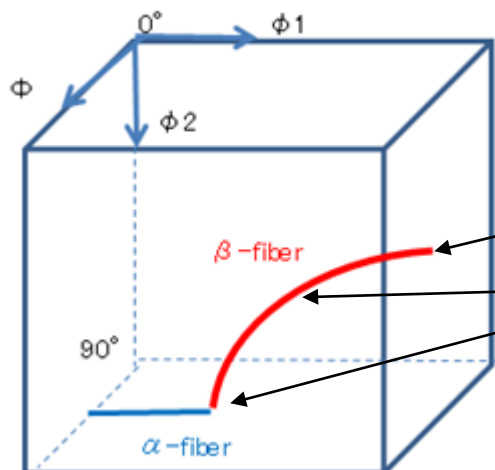
入力極点図から ODF 解析

VolumeFraction からの ODF 図



FCCのβファイバー

β-Fiber は3次元的な Fiber で今までの考え方では通用致しません。



Copper	{112}<-1-11>	(90.0, 35.26, 45.0)
S	{213}<-3-64>	(58.98, 36.70, 63.43)
Brass	(110)<-1-21>	(35.26, 45.0, 90.0)

Model ODF

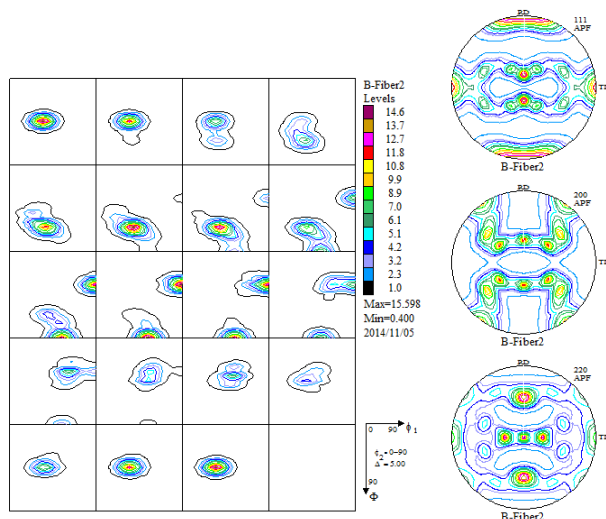
Crystal Symmetry: **C** (Cubic) | Sample Symmetry: Orthorhombic | Grid Cells for Output ODF: 5.0*5.0 | Step: 0.50 | Diagram Range +/-: 45.0

Centre of Orientation plots (FWHM ϕ₁, FWHM ϕ, FWHM ϕ₂)

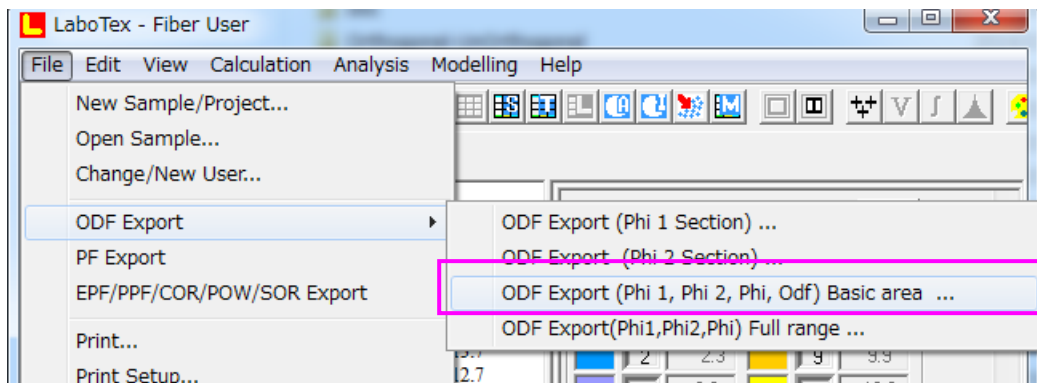
No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ ₁	FWHM ϕ	FWHM ϕ ₂	Volume Fraction
1	{1 1 2}<1 -1 -1> copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	10.0	20.00	20 %
2	{1 3 2}<6 -4 3> S-1	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	10.0	20.00	5 %
3	{2 3 1}<3 -4 6> S-2	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	10.0	20.00	5 %
4	{2 1 3}<-3 -6 4> S-3	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	10.0	20.00	5 %
5	{2 3 1}<-3 -4 6> S-4	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	20.00	20.00	5 %
6	{1 1 0}<1 -1 2> brass	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	20.00	10.0	20.00	20 %
7	{1 1 1}<-1 -1 2>	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{1 0 1}<5 2 5>	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{5 2 5}<1 -5 1>	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{0 1 3}<1 0 0>	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Sample Name: B-Fiber2 | Project Name: Demo | Cell Parameters (Relative): a=1.0, b=1.0, c=1.0, α=90.0, β=90.0, γ=90.0

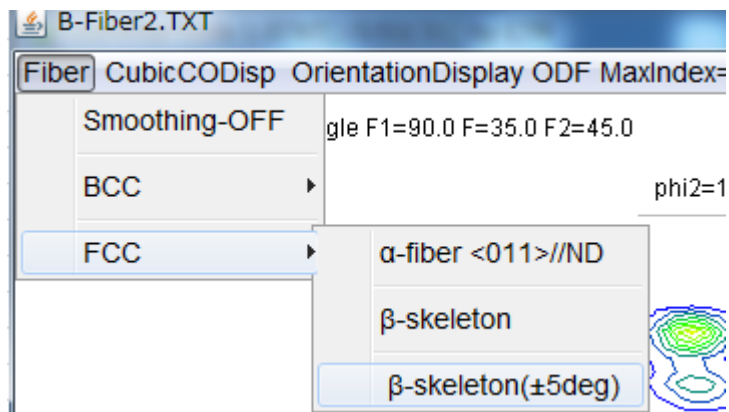
Creation of Model ODF | Exit



ODF 図を Export する。



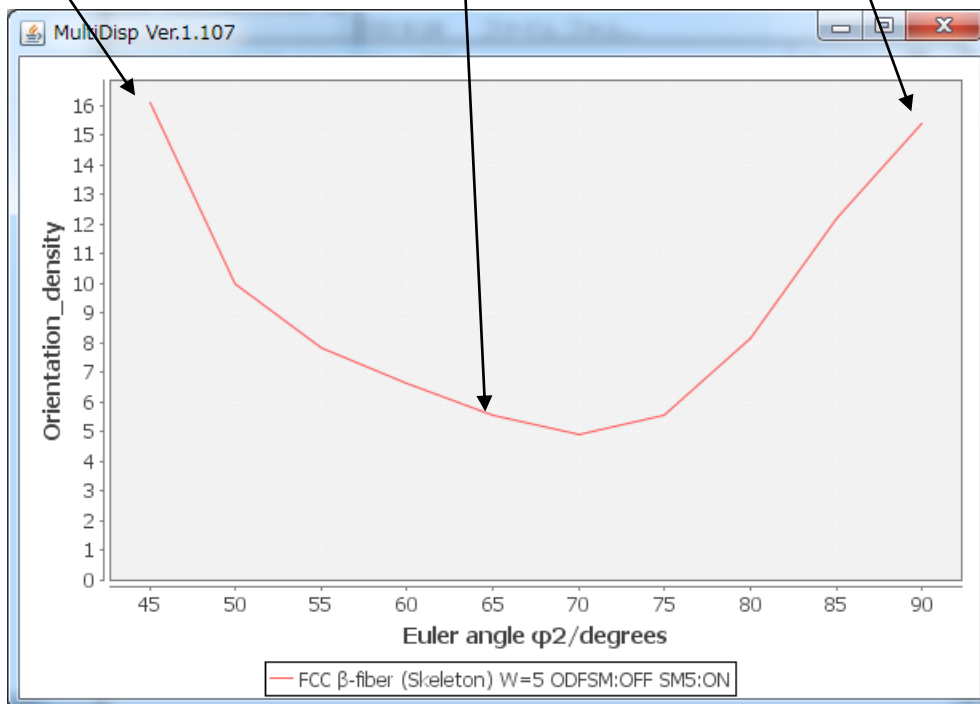
ODFDsisplay2 で読み込み



Brass (110)<-1-21>(35.26, 45.0, 90.0)

S {213}<-3-64>(58.98,36.70, 63.43)

Copper {112}<-1-11>(90.0, 35.26, 45.0)



β -Fiber のプロファイルが得られます。

Brass,S,Copper のみで作成した β -Fiber なので、凹んでいますが

しかし、同じ VolumeFraction でも方位密度が異なります。

これは以下の文献に記載されている現象です。

Determination of Volume Fractions of Texture Components with Standard Distributions in Euler Space

JAE-HYUNG CHO, A.D. ROLLETT, and K.H. OH

Table I. Standard Texture of Spherical Components with Gaussian Distribution ($b = 12.5$ Deg) and Its Multiplicity (Cubic/Orthorhombic) in the $90 \times 90 \times 90$ Deg Region

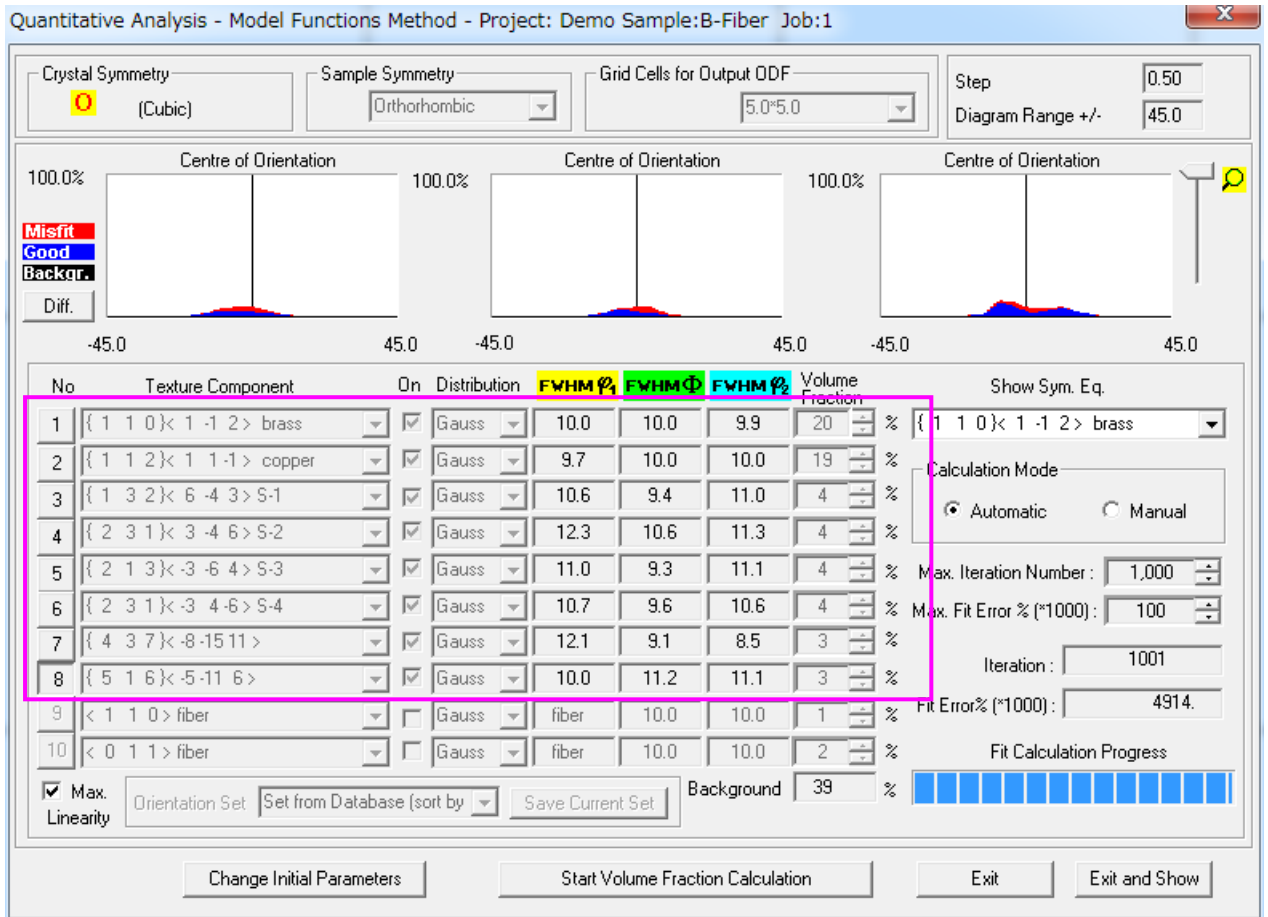
Miller Index {hkl}<uvw>	Euler Angles		ODF (Maximum at Exact Position)	Multiplicity (m)
	$\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$	$\{\alpha, \beta, \gamma\}$		
Bs, {110}<112>	{35.26 deg, 45 deg, 0 deg}	{54.74 deg, 45 deg, 0 deg}	130.95	2
Copper, {112}<111>	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2
S {123}<634>	{58.98 deg, 36.7 deg, 63.44 deg}	{31.02 deg, 36.7 deg, 26.57 deg}	56.89	1
Goss, {110}<001>	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
Cube, {001}<100>	$\{\varphi_1 + \varphi_2 = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\Phi = 0$ deg}	$\{\alpha + \gamma = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated cube, {001}<110>	$\{\varphi_1 + \varphi_2 = 45$ deg, 135 deg, $\Phi = 0$ deg}	$\{\alpha + \gamma = 45$ deg, 135 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated Goss, {110}<011>	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
{111}<112>	{90 deg, 54.75 deg, 45 deg}	{0 deg, 54.74 deg, 45 deg}	130.95	2
{112}<110>	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2

β -Fiber のグラフは以下の方位密度を参照しています。

Euler 角度から結晶方位を決めると

ϕ 1	Φ	ϕ 2		
90.0	35.26	45.0	Copper	{112}<-1-11>
81.24133333	35.18666667	49.372		
73.15177776	35.40222222	53.901		{437}<-8-15 11> (69.17,35.54,53.13)
65.73133329	35.90666665	58.587		
58.97999992 3	36.69999996	63.43	S	{213}<-3-64>
52.89777765	37.78222215	68.43		
47.48466648	39.15333322	73.587		
42.74066641	40.81333317 7	78.901		{516}<-5-11 6>(43.38,40.36,78.69)
38.66577744	42.762222	84.372		
35.25999957	44.99999971	90.0	Brass	(110)<-1-21>

β -FiberとしてVolumeFractionを得る



β -FiberとしてのVolumeFractionは、
 Brass+S+Copper+{437}<-8-1511>+{516}<-5-116>である。
 $S=S_1+S_2+S_3+S_4$

