

# 結晶方位の定量方法（定性方法）

2016年08月10日

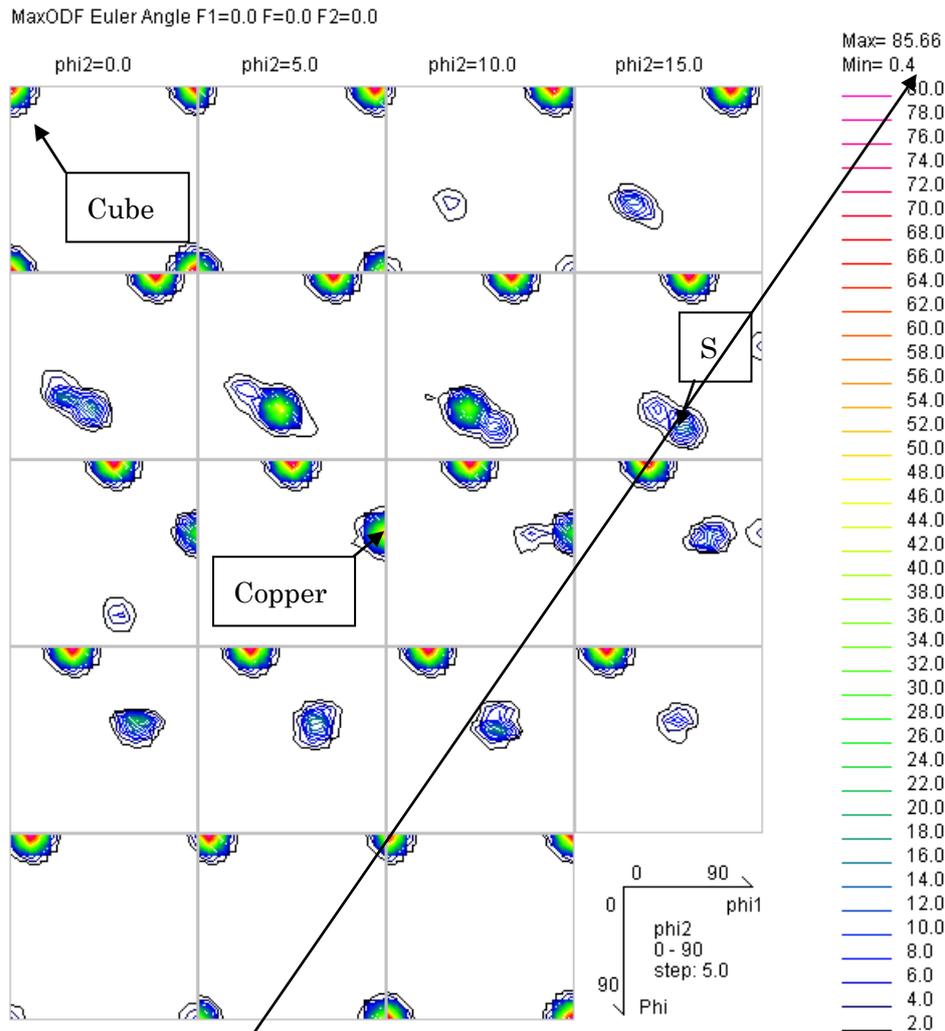
*HelperText Office*

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

## 概要

材料特性の1要素として異方性が考えられ塑性加工などにより結晶方位のコントロールが行われている。従来、極点図からODF解析を行い、ODF図の各方位密度強度で比較していました。これは、定量ではなく、定性的な比較と言えます。

例えば、**C u b e** , **C o p p e r** , **S**方位が**20%**含まれるODF図を考えると



**M i n = 0 . 4**は**r a n d o m**が**40%**である事になります。

方位密度を比較すると

Orientation	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	ODF
{0 0 1}<1 0 0> cube	0.0	0.0	0.0	85.66
{1 1 2}<-1 -1 1> copper	90.0	35.26	45.0	54.65
{1 3 2}<6 -4 3> S	27.03	57.69	18.43	17.04

でも、定量値が同じでも方位密度は同一ではありません。

(M a x c O D F 密度は3方向の放物線近似で計算しています。)

しかし、**v o l u m e F r a a c t i o n** (定量値) は同じ**20%**です。

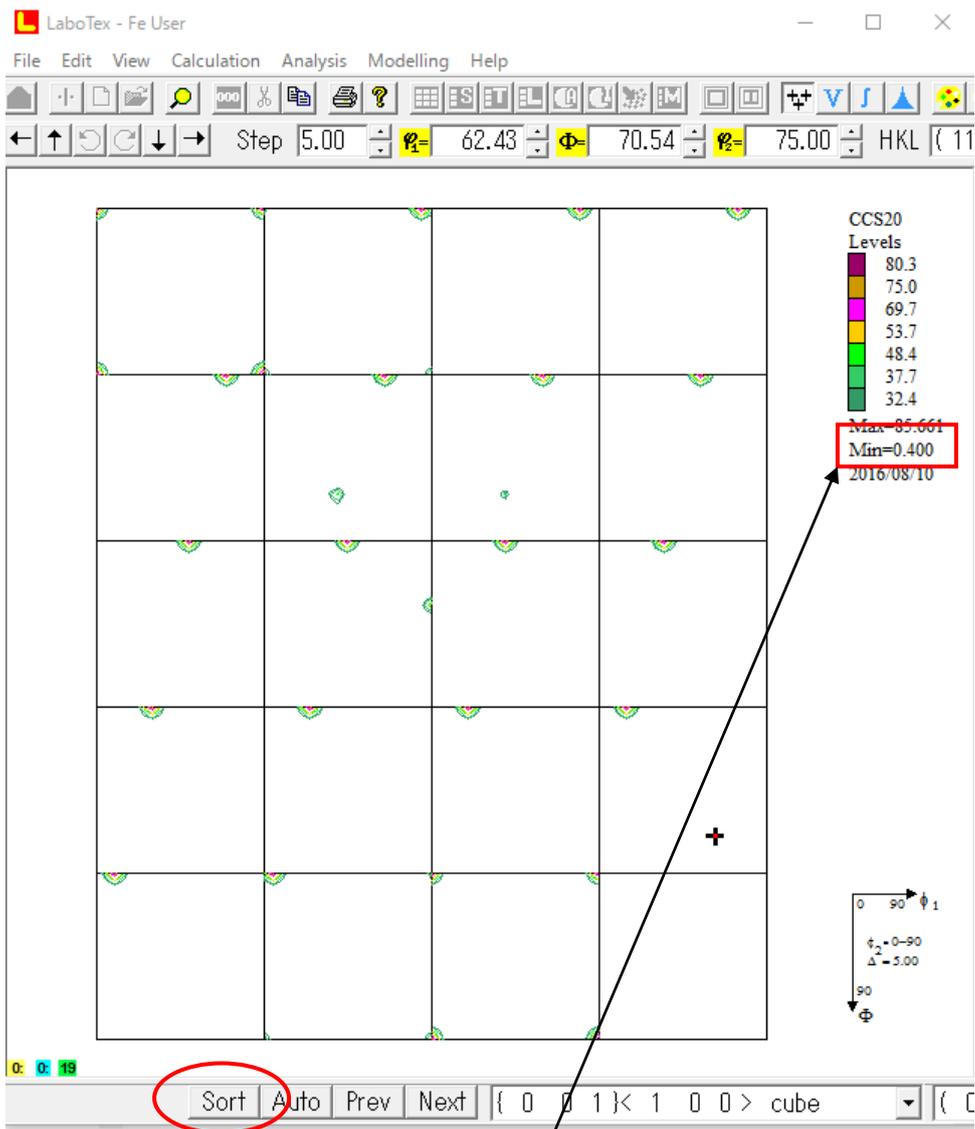
この様にODF解析まででは、定量ではなく定性的に扱いになります。

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

を参考にしてください。

**V o l u m e F r a c t i o n**計算は**L a b o T e x** , **T e x T o o l s**でのみ計算可能です。

# LaboTexによる結晶方位別最大方位密度 LIST



ODF Values for Orientations from Database (Sort by ODF Values)

Project: Demo Symmetry: O-Cubic  
Sample: CCS20 Job: 1

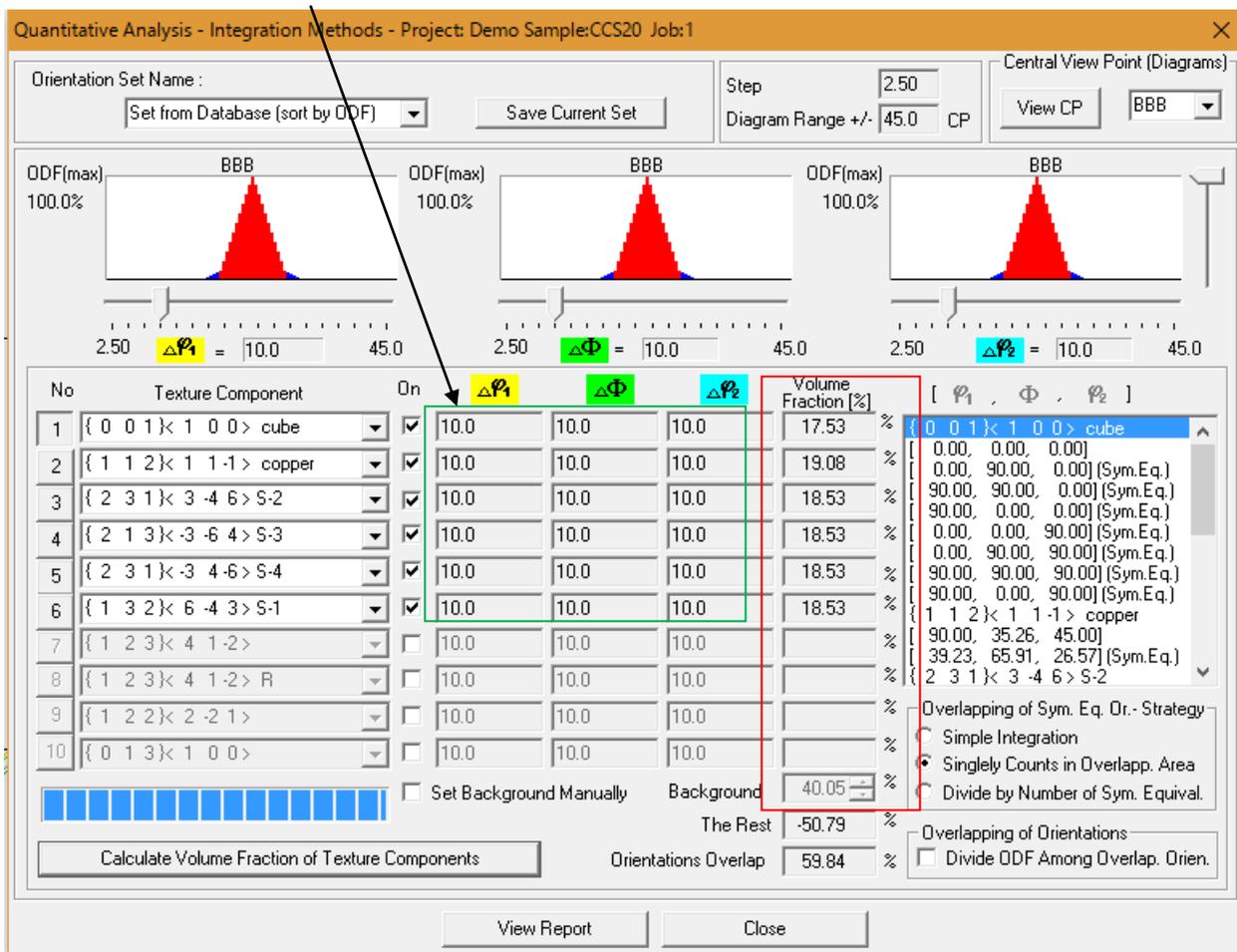
No	Orientation Type Name	ODF (average)	(HKL)[UVW]	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	ODF
1	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	85.661	{ 0 0 1 } [ 1 0 0 ]	0.0	0.0	0.0	85.661
2	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	47.531	{ 0 1 0 } [ 1 0 0 ]	0.0	90.0	0.0	85.661
3	{ 2 3 1 } < -3 -4 6 > S-2	13.953	{ 0 1 0 } [ 0 0 1 ]	90.0	90.0	0.0	85.661
4	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	13.953	{ 0 0 1 } [ 0 -1 0 ]	90.0	0.0	0.0	85.661
5	{ 2 3 1 } < -3 -4 6 > S-4	13.953	{ 0 0 1 } [ 0 -1 0 ]	0.0	0.0	90.0	85.661
6	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	13.953	{ 1 0 0 } [ 0 -1 0 ]	0.0	90.0	90.0	85.661
7	{ 1 2 3 } < 4 1 2 >	1.416	{ 1 0 0 } [ 0 0 1 ]	90.0	90.0	90.0	85.661
8	{ 1 2 3 } < 4 1 2 > R	1.416	{ 0 0 1 } [ -1 0 0 ]	90.0	0.0	90.0	85.661
9	{ 1 2 2 } < 2 -2 1 >	1.014					
10	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	0.433					
11	{ 1 1 1 } < -1 -1 2 >	0.408					
12	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	0.402					
13	{ 1 1 1 } < 0 1 -1 >	0.401					
14	< 1 0 1 > fiber	0.401					
15	{ 2 3 3 } < 0 1 -1 >	0.400					
16	{ 1 1 0 } < 1 -1 1 >	0.400					
17	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	0.400					
18	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	0.400					
19	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	0.400					
20	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	0.400					
21	{ 3 2 3 } < 1 -3 1 >	0.400					
22	{ 1 1 3 } < 1 -1 0 >	0.400					
23	{ 62.43, 70.54, 75.00 } Cursor !!!	0.400					
24	{ 1 1 2 } < 1 -1 0 >	0.400					

View Report OK Cancel

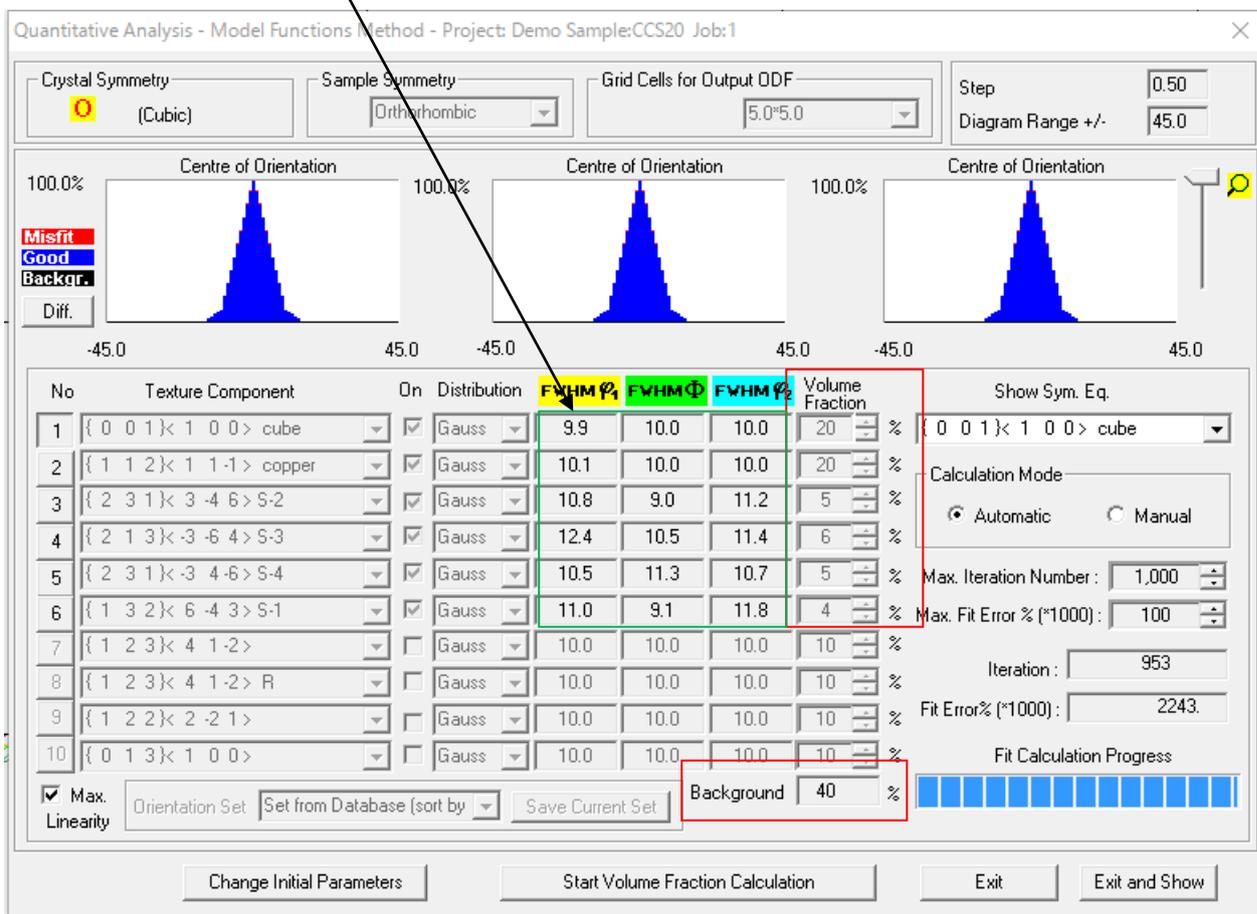
randomレベルが40% (0.4) であることが分かります。

## LaboTexでVolumeFraction計算

Euler角度の広がりを10degで計算 (S方位は合計しない、バックグラウンドはrandom)



Gauss関数近似 (広がりは自動計算) で定量を行う。(S方位は合計、バックグラウンドはrandom)



TextToolsでVolumeFraction計算

Euler角度の広がりを10degで計算

The screenshot shows the 'Orientation Volume Fraction' dialog box. The 'Ideal Orientations' radio button is selected. The dropdown menu is set to 'All of above'. The tolerance is set to 10 degrees. The 'Fibers' section is unselected. The ODF File Name is 'C:\CTR\DATA\CCS20.HODF'. The result field shows: Cube=15.84%, Goss=0.29%, Brass=0.61%, S=16.89%, Copper=16.55%, R-Cube=0.30%. A progress bar is visible below the result field.

Euler角度の広がりを12.5degで計算

The screenshot shows the 'Orientation Volume Fraction' dialog box. The 'Ideal Orientations' radio button is selected. The dropdown menu is set to 'All of above'. The tolerance is set to 12.5 degrees. The 'Fibers' section is unselected. The ODF File Name is 'C:\CTR\DATA\CCS20.HODF'. The result field shows: Cube=19.72%, Goss=0.64%, Brass=1.95%, S=21.91%, Copper=20.43%, R-Cube=0.67%. A progress bar is visible below the result field.

Euler角度の広がりを15degで計算

The screenshot shows the 'Orientation Volume Fraction' dialog box. The 'Ideal Orientations' radio button is selected. The dropdown menu is set to 'All of above'. The tolerance is set to 15 degrees. The 'Fibers' section is unselected. The ODF File Name is 'C:\CTR\DATA\CCS20.HODF'. The result field shows: Cube=20.45%, Goss=0.95%, Brass=3.64%, S=28.23%, Copper=24.00%, R-Cube=0.95%. A progress bar is visible below the result field.

Euler角度の広がりは加工により異なります。TextToolsでは広がりを手入力  
このことからLaboTexにGauss関数Fitting機能は優れています。

以下に結晶方位の定性的な評価法を説明します。

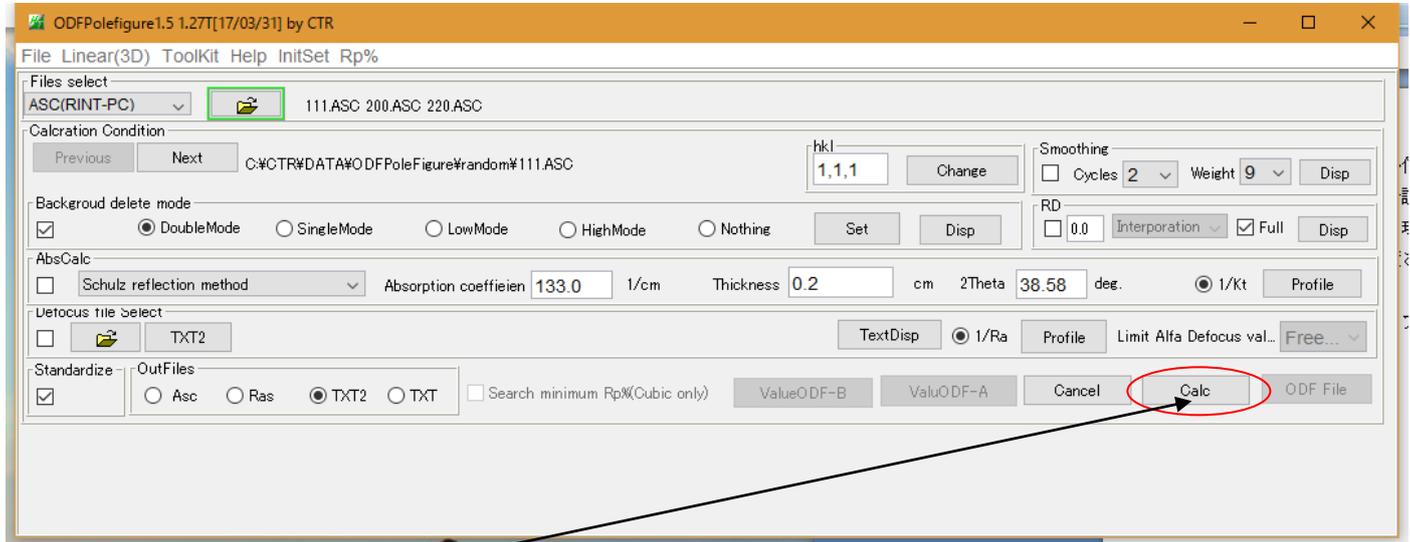
ODF解析はCTRODFで説明します。

CTRODFはODF解析を理解して頂く為のソフトウェアであり、試用期限があります。

ODF解析を行う場合、市販されている LaboTex、TexTools、StandardODF をご使用下さい。

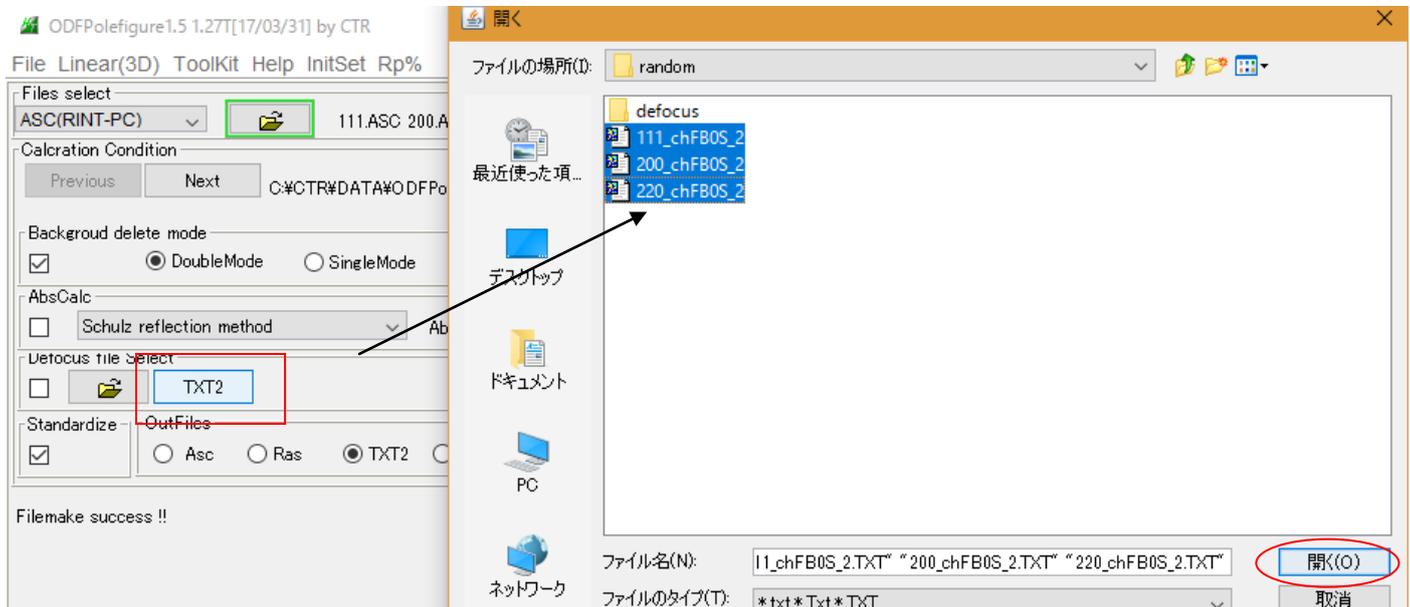
## 1. defocus 補正テーブル作成

C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\random 以下のデータ 111,200,220 を選択

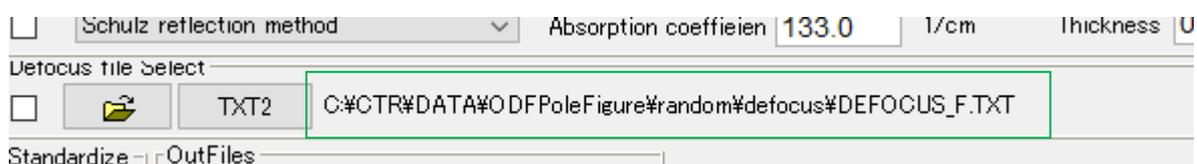


バックグラウンドのみ削除 Calc

計算されたTXT2ファイルをdefocusファイルとして選択

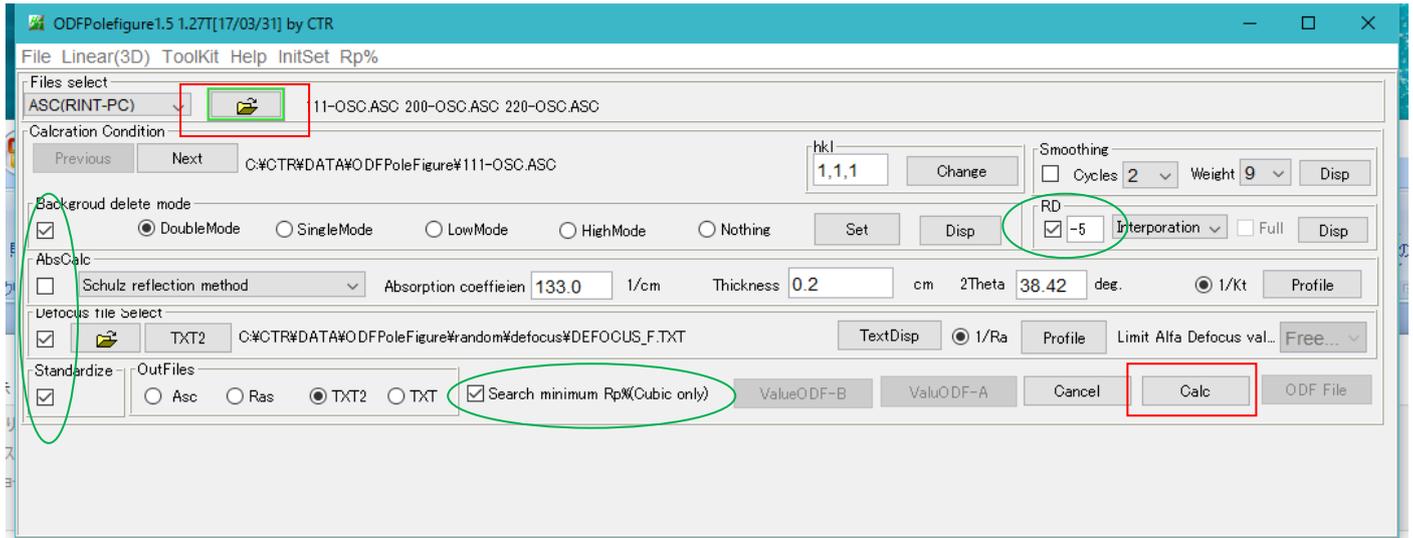


defocus TABLEとして登録されます

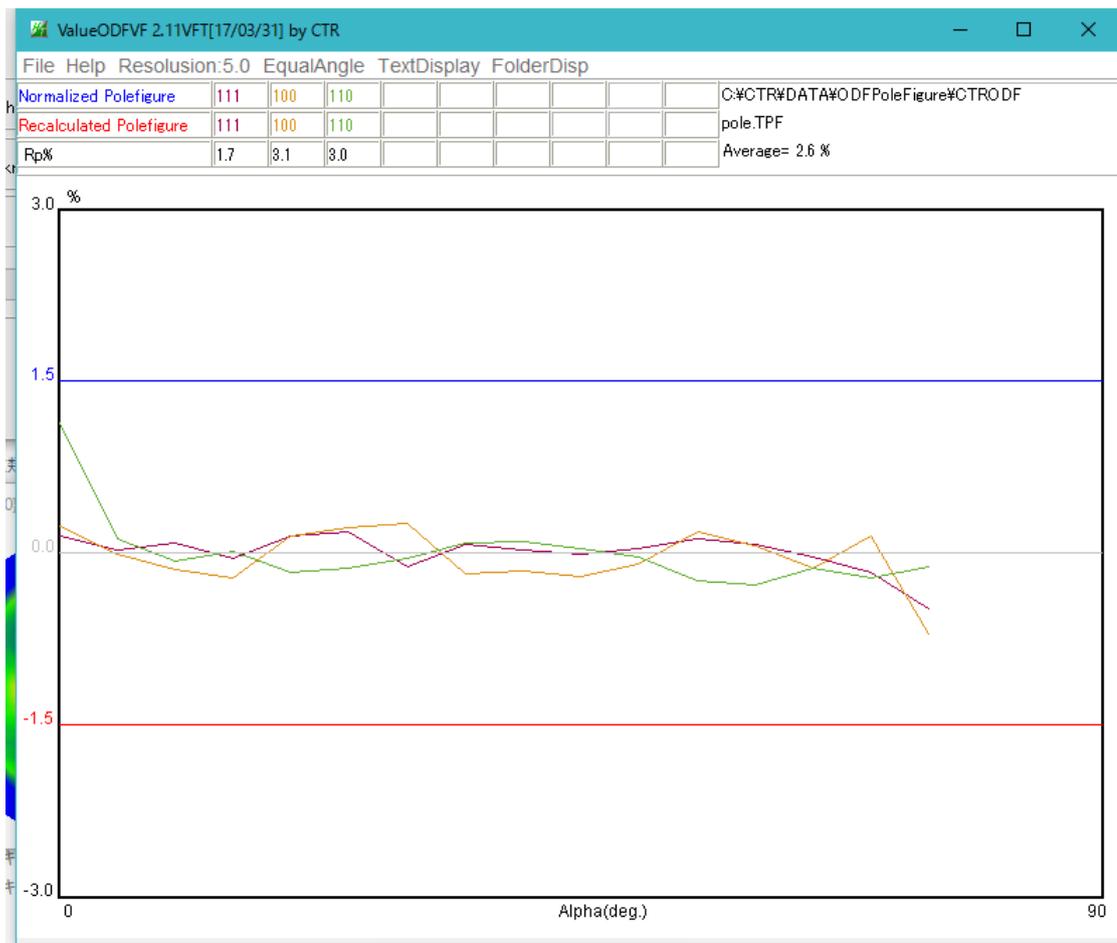
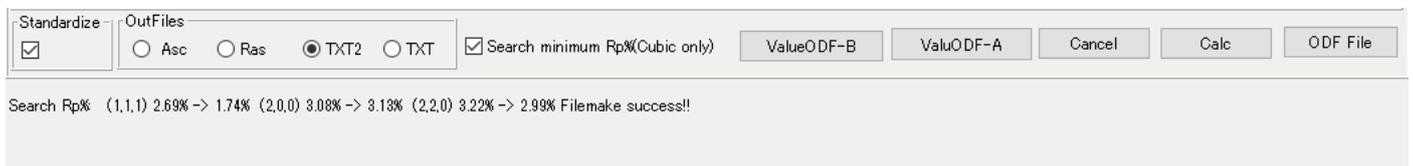


## 2. 配向データの極点処理

C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\以下のデータ 111,200,220 を選択



バックグラウンド除去、RD補正 (-5)、defocus補正、Rp%Searchを指定して Calc



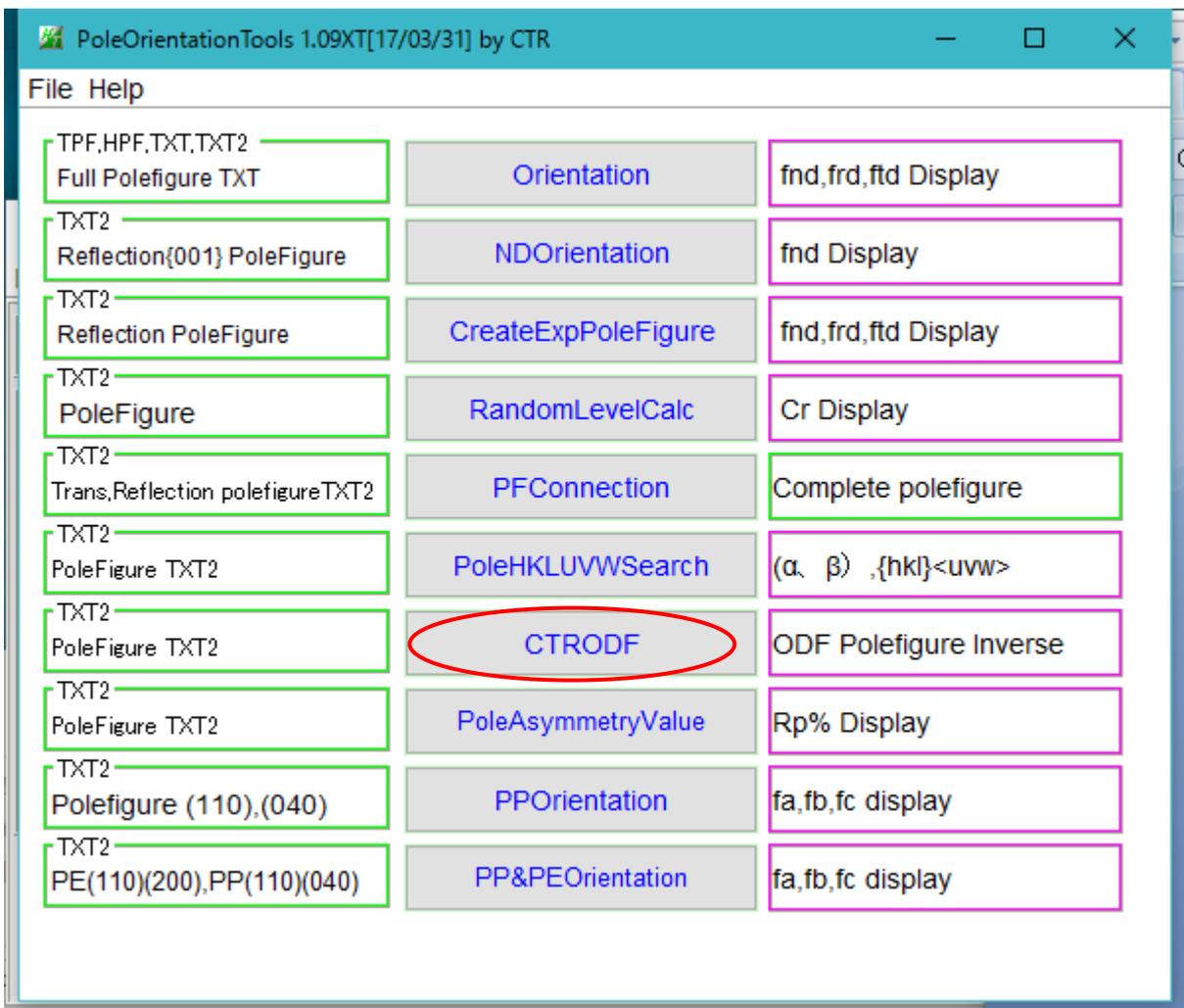
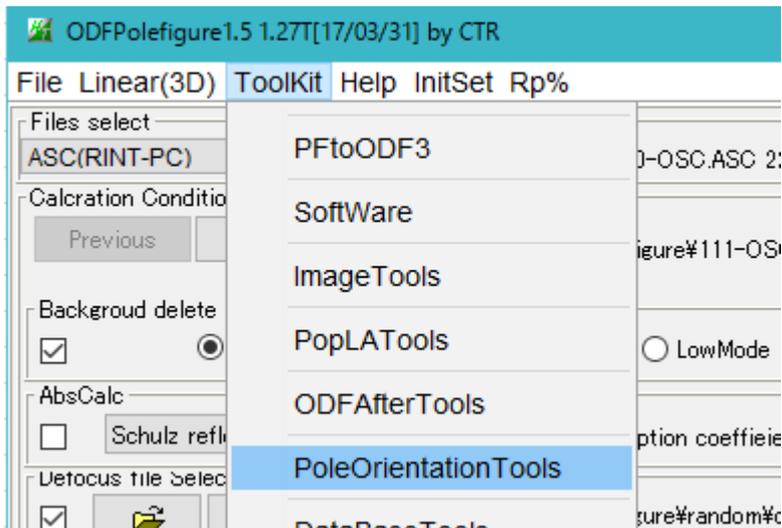
解析Errorが2.6%で、入力極点図には、ほとんどErrorが含まれていません。

Rp%は、入力極点図とODF再計算極点図の差を再計算極点図との%で表しています。

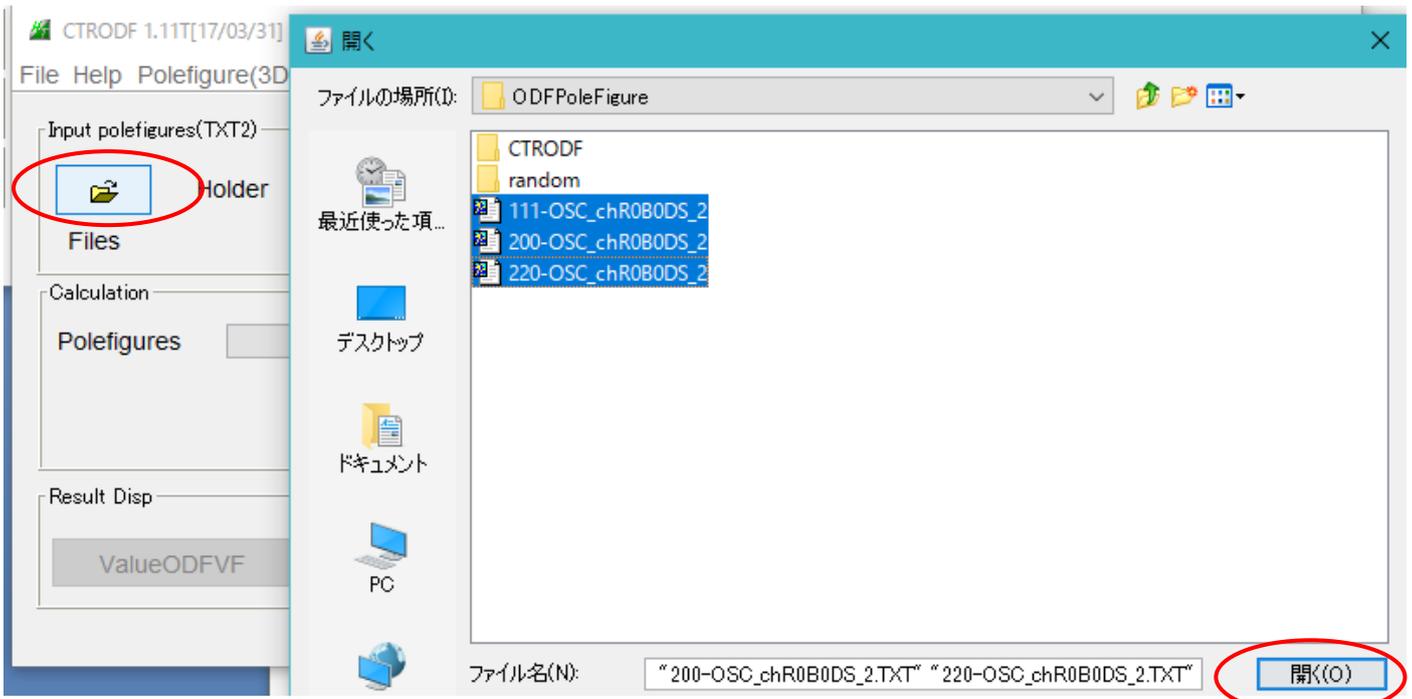
Rp%を使って入力極点図の正当性を評価することは重要です。

### 3. ODF 解析

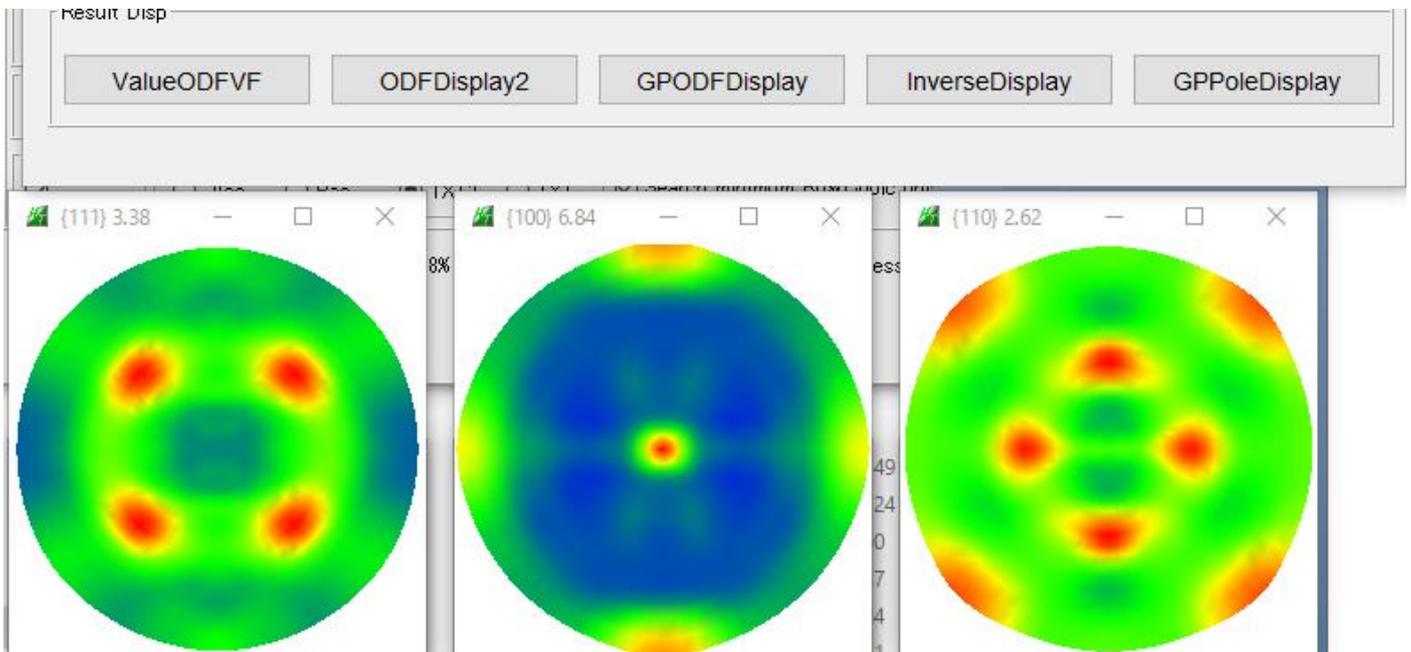
LaboTex、TexTools,StandardODF などの ODF 解析用データは、ODF File ですが、CTRODF は、TooKit->PoleOrientation->CTRODF です。



C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure以下の TXT2 データを選択



CalcでODF解析がstart



ODF ☒

ODFDisplay2

ODFDisplay2 1.41YT[17/03/31] by CTR

File RoeModeEnable Help 3dispODF OtherODF Cubic

ODF

LaboTex    popLA    StdODF    TexTools    StdODF(c:#OD...    BUNGE

ODFTXTFile(or ODF15)

C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\CTRODF\ODF.TXT

Contour(Max=40)

ODFMax= 12.95507...   DispMax    Steplevel    Number=12

Sample Symmetry( $\phi$  1)

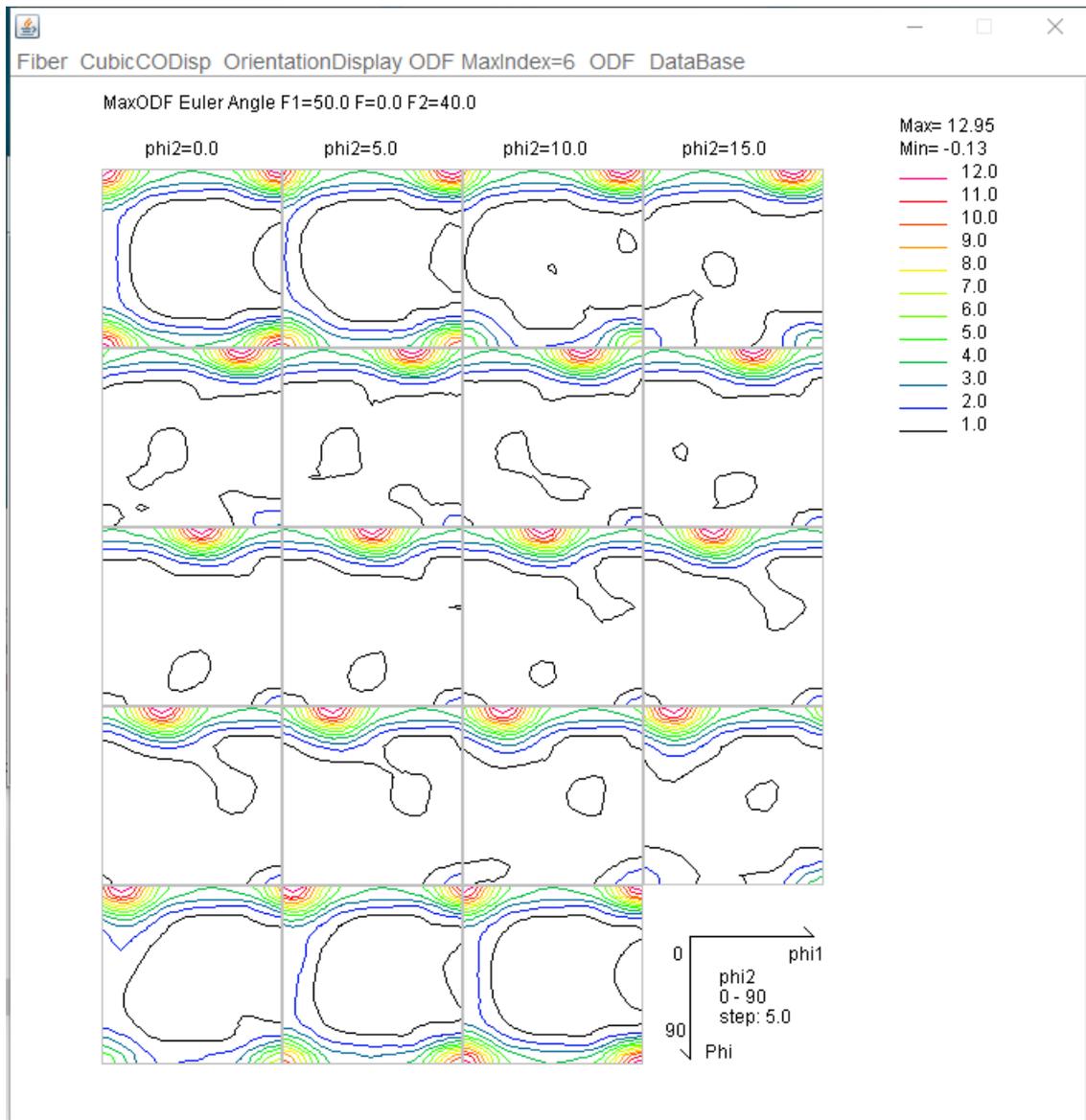
Display

Bunge    Phi1    Phi2    PHI

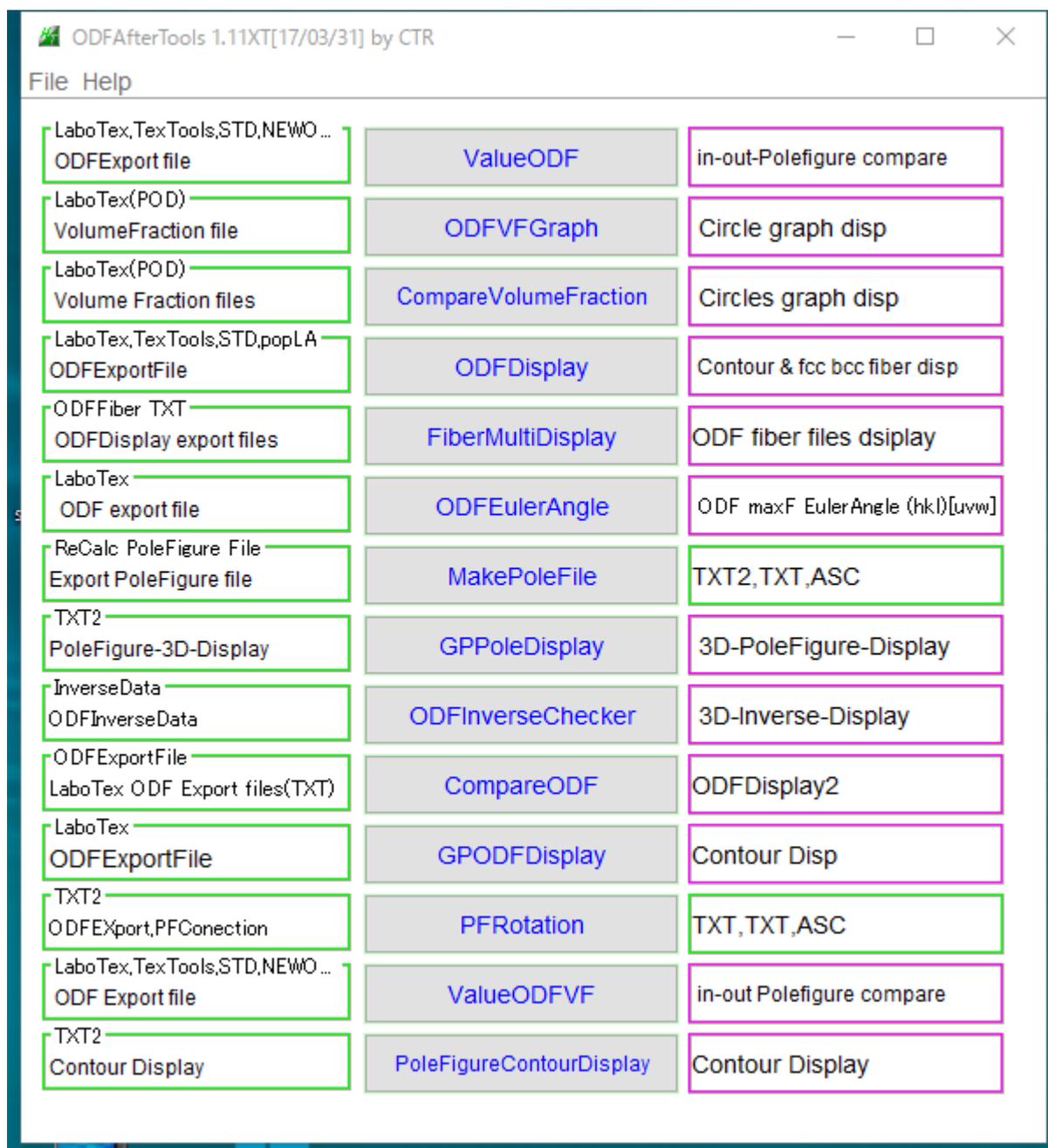
Roe    Phi1    RINT  

Smoothing

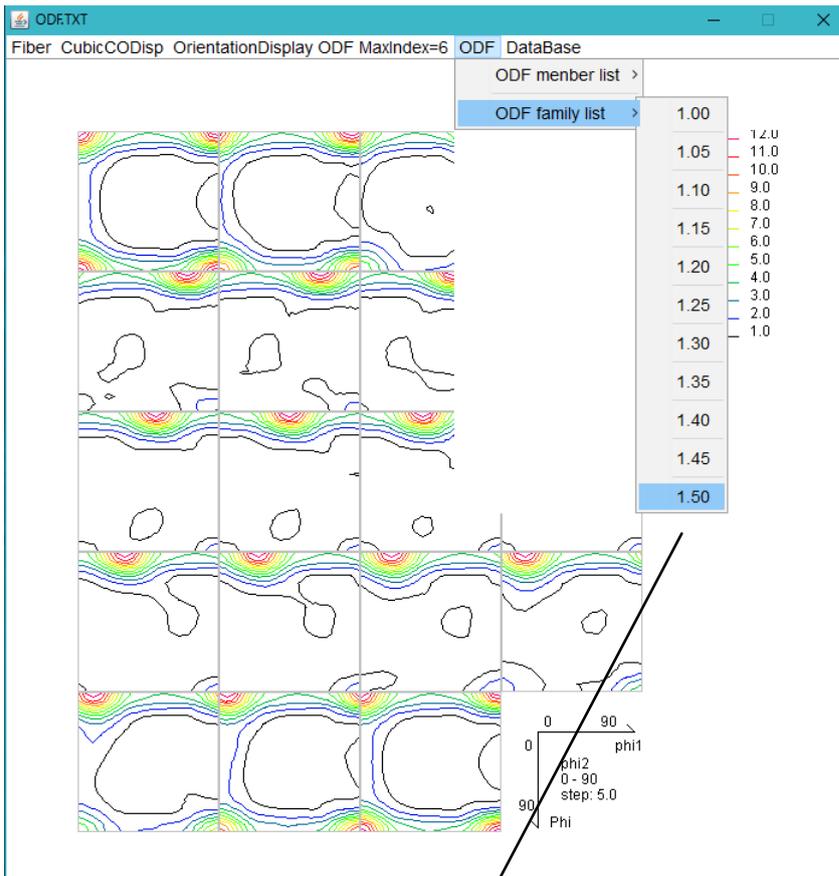
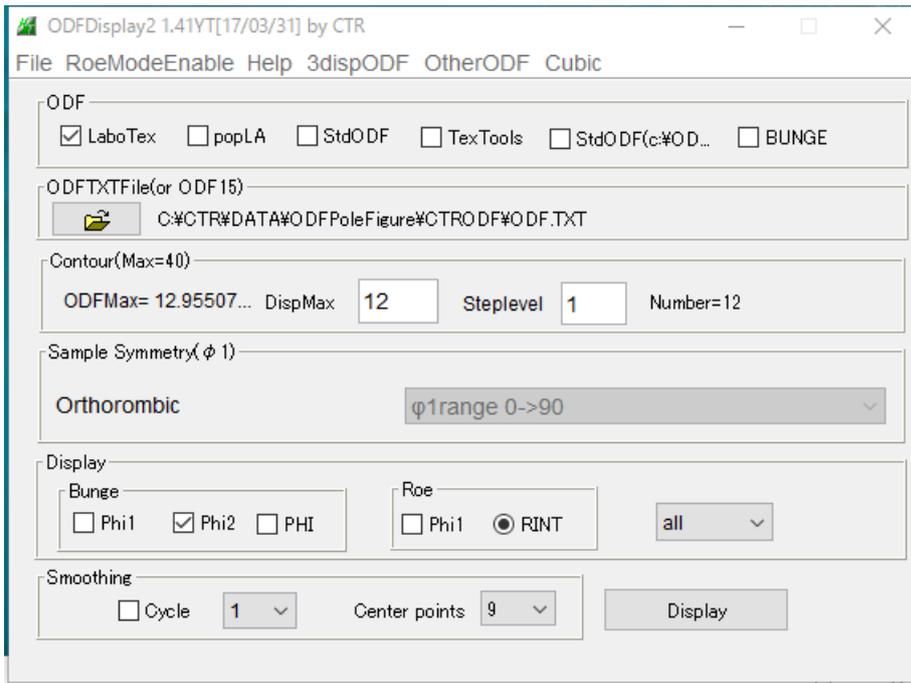
Cycle       Center points



級数展開法ODFの場合、ゴーストが含まれ、方位密度が小さくなったり  
最小値が、randomレベルより小さくなる傾向があります。



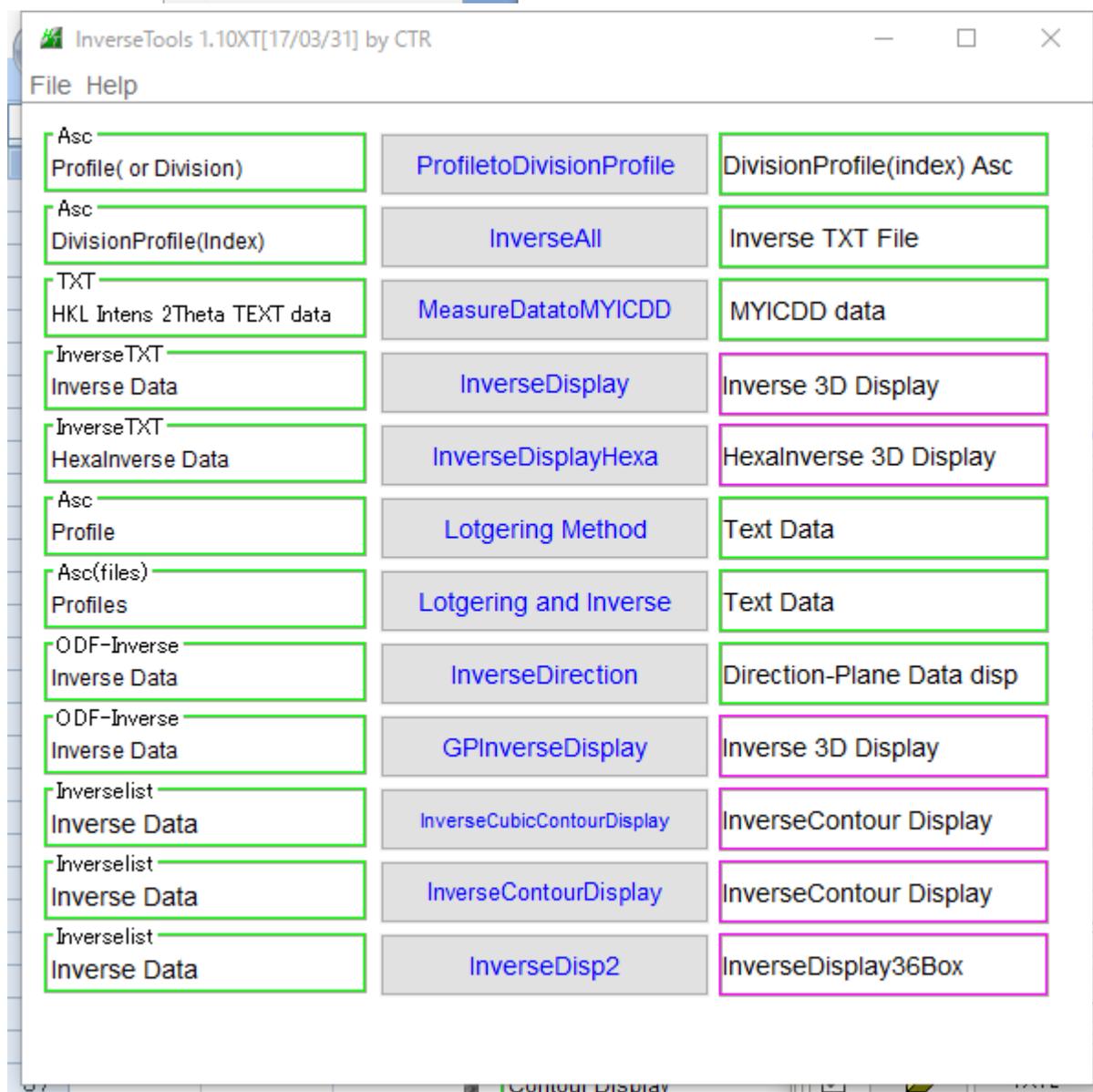
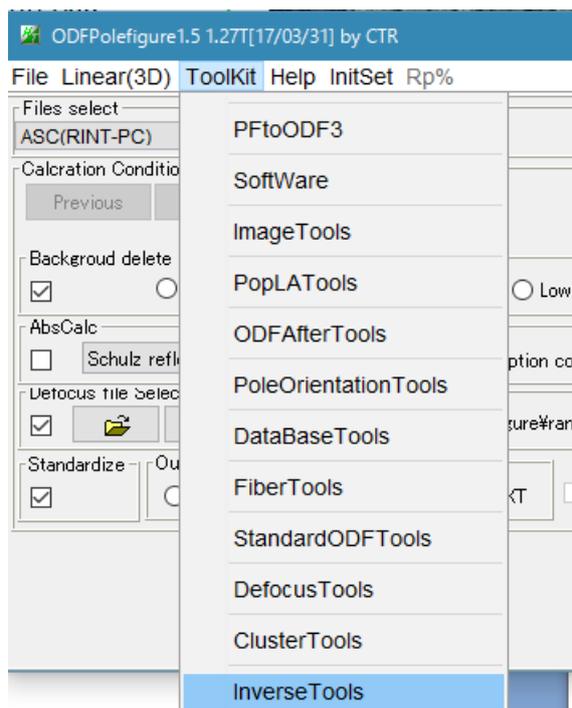
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\CTRODF\ODF.TXT を選択



各種結晶方位密度が表示されます。

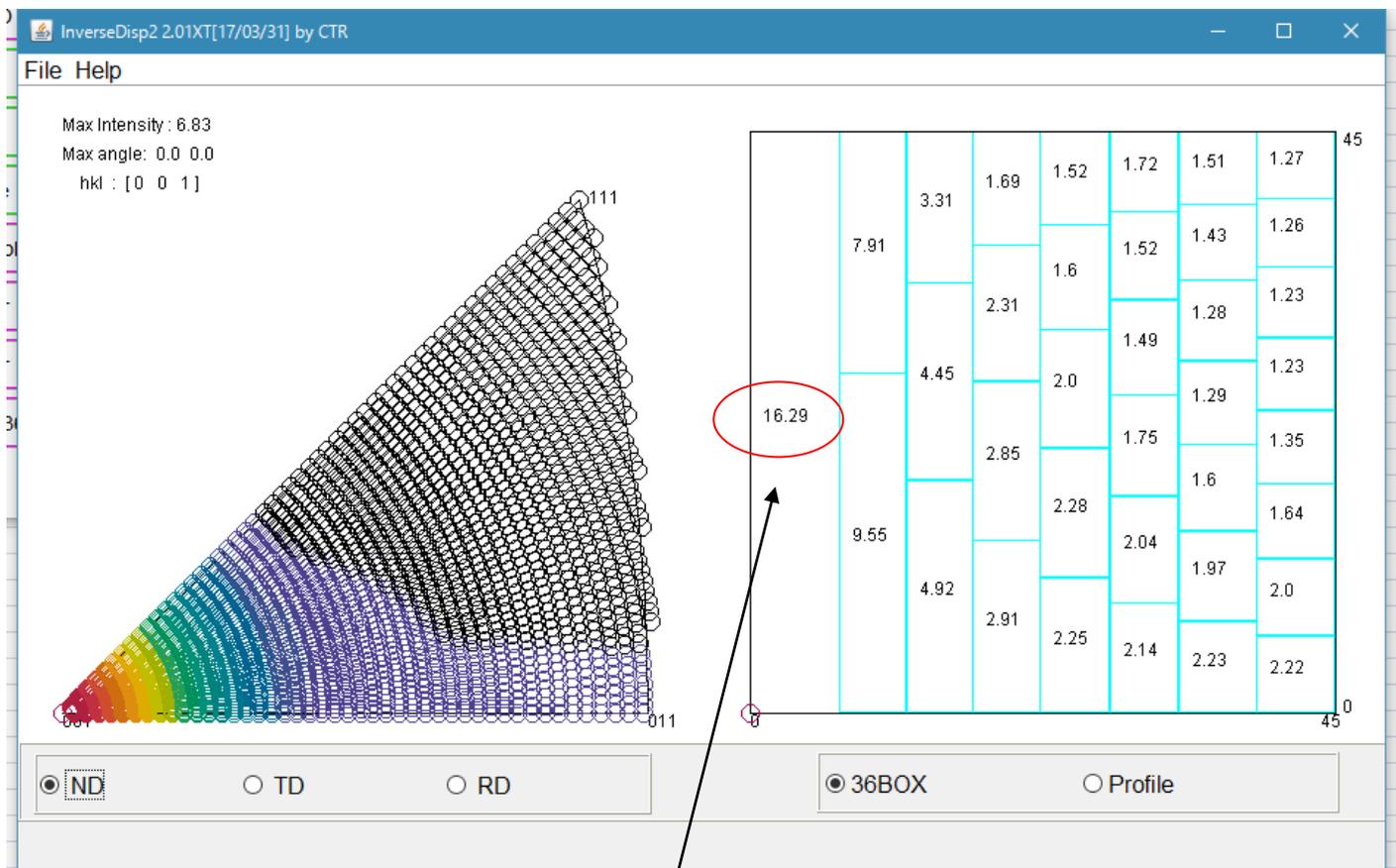
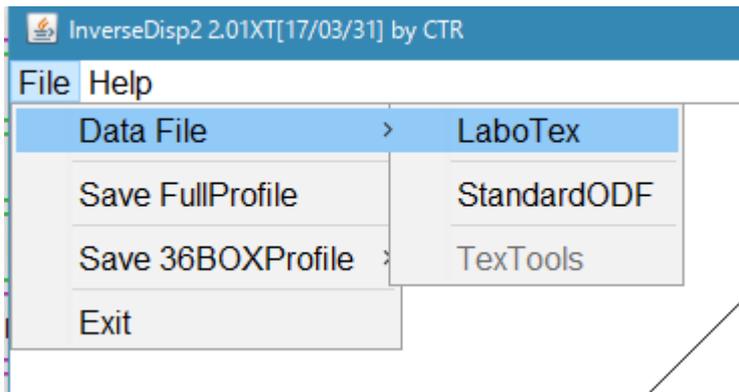
Orientation	$\phi 1$	$\Phi$	$\phi 2$	ODF
{0 0 1}<1 0 0> cube	0.0	0.0	0.0	12.96
{0 0 1}<2 -1 0> CH	26.57	0.0	0.0	4.88
{0 0 1}<1 -1 0> RW(H)	45.0	0.0	0.0	4.03
{0 1 3}<1 0 0>	0.0	18.43	0.0	3.11
{0 1 1}<1 0 0> Goss	0.0	45.0	0.0	2.64
{0 1 2}<1 0 0> Q1	0.0	26.57	0.0	2.62

ODFPoleFigure1.5->ToolKit->InverseTools



InverseDisp2

C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\CTRODF\Inverse.TPF を選択



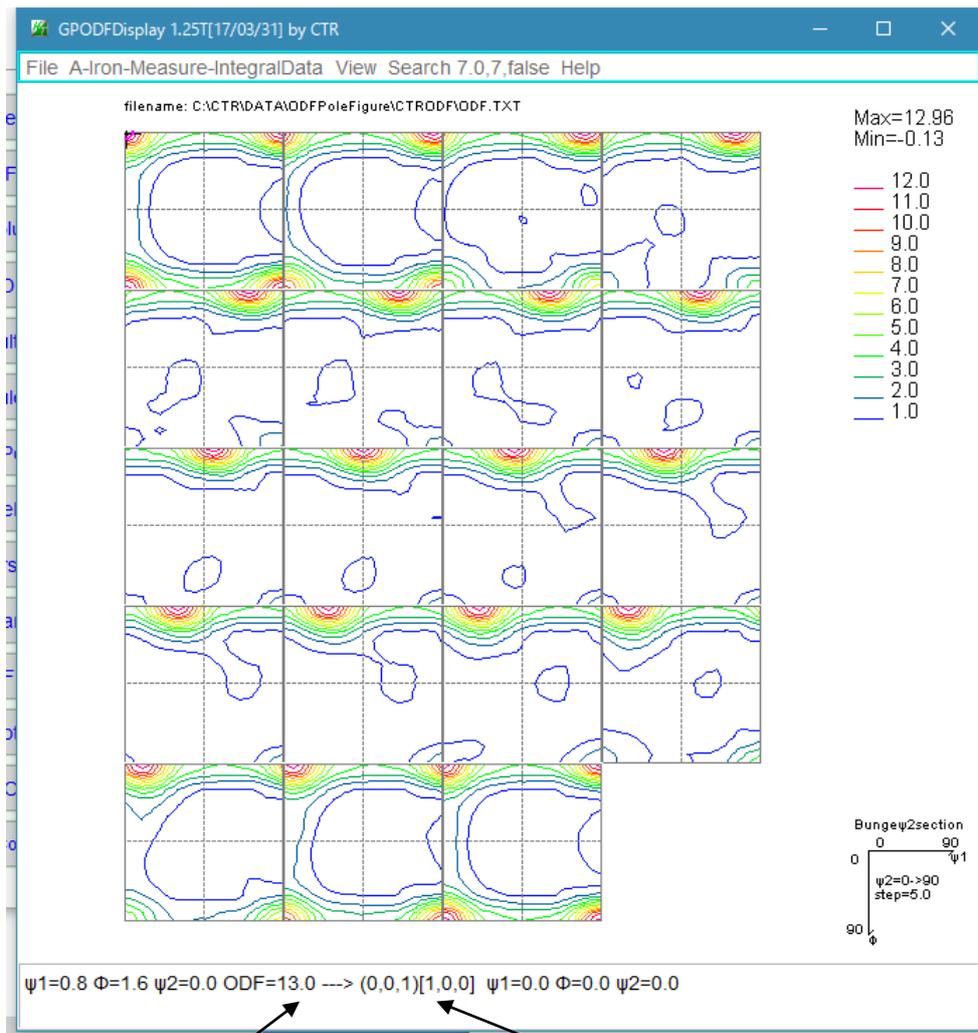
逆極点図を36分割して、BNOX内の定性値(%)を表示します  
逆極点図のBOX範囲はInverseDisp2ソフトウェア説明書を参照してください。

ODF 図から結晶方位を調べる。

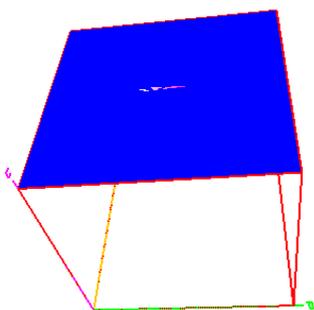
ODFPoleFigure1.5->ToolKit->ODFAfterTools



C:\¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥CTRODF¥ODF.TXT を選択



マウスを、ODF 図上を移動すると、結晶方位を表示、クリックすると+が表示  
更に、此処をクリックすると、結晶方位図を表示、など色々

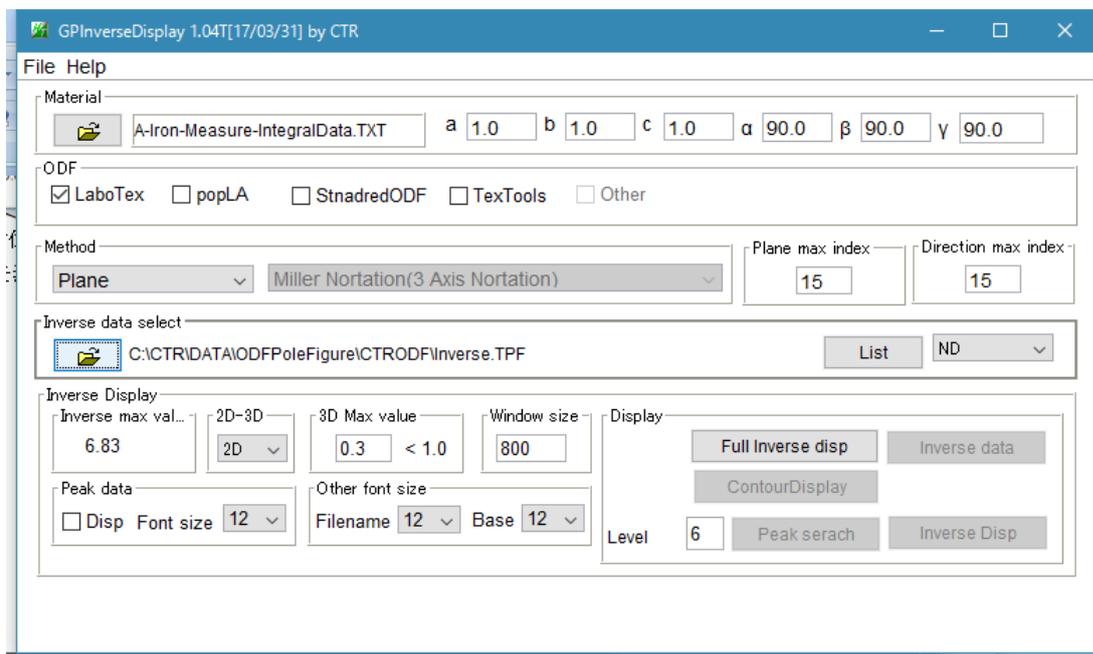


逆極点図から ND,TD,RD 方向の方位を調べる。

ODFPoleFigure1.5->ToolKit->InverseTools

GPInverseDisplay

C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\CTRODF\Inverse.TPF を選択

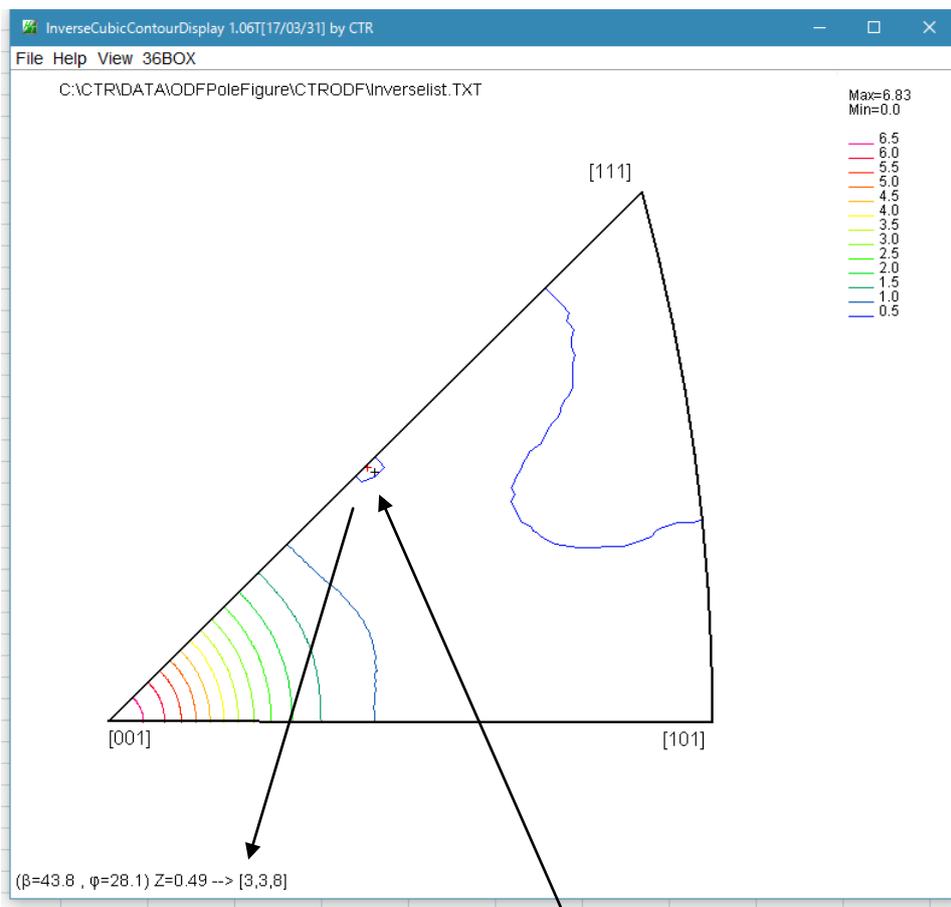


Full Inverse disp

Inverse data

ContourDisplay

Key 操作



マウスカーソルをクリックや移動すると方位が表示されます。