結晶方位の定量方法(定性方法)

2016年08月10日 *HelperTexc Office* http://www.geocities.jp/helpertex2 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、Cube, Copper, S方位が20%含まれるODF図を考えると



Min=0.4はrandomが40%である事になります。

方位密度を比較すると

					1
Orientation	φ1	Φ	φ2	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。

(MaxcODF密度は3方向の放物線近似で計算しています。)

しかし、volumeFraaction (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 を参考にして下さい。

VolumeFraction計算はLaboTex, TexTools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



r a n d o m レベルが 4 0 % (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、バックグランドはrandom)

Quantitative Analysis - Integration Methods - Project: Demo Sample:CCS20 Job:1 X				
Orientation Set Name :		Step 2.50	Central View Point (Diagrams)	
Set from Database (sort by ODF)	▼ Save Current Set	Diagram Range +/- 45.0 C	P View CP BBB 💌	
0DF(max) 100.0%	0DF(max) 100.0%	B ODF(max) 100.0%		
2.50 <u>A141</u> = 10.0 45.	$\begin{array}{c c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 $	0.0 45.0 2.50	△¥2 = 10.0 45.0	
1 { 0 0 1 × 1 0 0 > cube 2 { 1 1 2 × 1 1 - 1 > copper 3 { 2 3 1 × 3 4 6 > S - 2	Image: 10.0 10.0 Image: 10.0 10.0 Image: 10.0 10.0 Image: 10.0 10.0	10.0 17.53 % (0.0 10.0 19.08 % [0.0 10.0 19.08 % [0.0 10.0 18.53 % [0.0	1)<100>cube <	
4 { 2 1 3 k ⋅ 3 ⋅ 6 4 > 5 3 5 { 2 3 1 k ⋅ 3 4 ⋅ 6 > 5 4 6 { 1 3 2 k 6 ⋅ 4 3 > 5 1 •	Image: 10.0 10.0 10.0 Image: 10.0 10.0 10.0 Image: 10.0 10.0 10.0	10.0 18.53 % 0.0 10.0 18.53 % 0.0 10.0 18.53 % 190.0 10.0 18.53 % 190.0 10.0 18.53 % 190.0	0, 0.00, 90.00] (sym.Eq.) 0, 90.00, 90.00] (sym.Eq.) 10, 90.00, 90.00] (sym.Eq.) 10, 0.00, 90.00] (sym.Eq.) 2 \ 1 1 -1 > copper	
7 {1 2 3} × 4 1 ⋅ 2> 8 {1 2 3} × 4 1 ⋅ 2> B 9 {1 2 2} × 2 ⋅ 2 ⋅ 1>		10.0 % [900 39.2 10.0 % { 2 3 10.0 % Over	10, 35,26, 45,00] (3, 65,91, 26,57] (Sym.Eq.) 1 }< 3 -4 6 > S-2 ▼ lapping of Sym. Eq. 0rStrategy →	
10 { 0 1 3} 1 0 0>		10.0 % C Si	mple Integration nglely Counts in Overlapp. Area	
Calculate Volume Fraction of Texture (Components Orient	Background 40.05 2 % Di The Rest 50.79 % Over ations Overlap 59.84 % D	vide by Number of Sym. Equival. lapping of Orientations ivide ODF Among Overlap. Orien.	
View Report Close				

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、バックグランドはrandom)



TexToolsでVolumeFraction計算

Euler角度の広がりを10degで計算

Orientation Volume Fraction	×
 Ideal Orientations All of above φ1 # Φ # φ2 # Tolerance (degree) 10 With sample symmetrical orientations (4 fold) 	C Fibers gama fiber (phi = 55, phi2 = 45) ▼ h 1 k 1 I 1 Tolerance (degree) 15
ODF File Name C#CTR#DATA#CCS20.HODF	»
Result: Cube=15.84%Goss=0.29%Brass=0.61%S=16.89%Co	ppper=16.55%,R-Cube=0.30%; Calculate
	Cancel

Euler角度の広がりを12.5degで計算

Orientation Volume Fraction	×
 ✓ Ideal Orientations ✓ All of above ✓ φ1 # Φ # φ2 # ✓ Tolerance (degree) ✓ With sample symmetrical orientations (4 fold) 	C Fibers gama fiber (phi = 55, phi2 = 45) ▼ h 1 k 1 1 1 Tolerance (degree) 15
ODF File Name C:¥CTR¥DATA¥CCS20.HODF	>>
Result: Cube=19.72%Goss=0.64%Brass=1.95%S=21.91%C	opper=20.43%;R-Cube=0.67%; Calculate Cancel

Euler角度の広がりを15degで計算

Orientation Volume Fraction	×
 ✓ Ideal Orientations ✓ All of above ✓	C Fibers gama fiber (phi = 55, phi2 = 45) h 1 k 1 1 Tolerance (degree) 15
ODF File Name C:#CTR#DATA#CCS20.HODF	>>>
Result: Cube=20.45%Goss=0.95%Brass=3.64%S=28.23%Co	pper=24.00%(R-Cube=0.95%) Calculate Cancel

Euler角度の広がりは加工により異なります。TexToolsでは広がりを手入力この事から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エアであり、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. d e f o c u s 補正テーブル作成

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

🔀 ODFPolefigure1.5 1.27T[17/03/31] by CTR — 🗆 🗙
File Linear(3D) ToolKit Help InitSet Rp%
Files select ASC(RINT-PC) 111.ASC 200.ASC 220.ASC
Calcration Condition Previous Next C#CTR#DATA#ODFPoleFigure#random#111.ASC hkl Smoothing 1,1,1 Change Cycles 2 v Weight 9 v Disp
Backgroud delete mode
AbsCalc BsCalc Schulz reflection method Absorption coefficien 133.0 1/cm Thickness 0.2 cm 2Theta 38.58 deg. I/Kt Profile
Defocus file Select Image: Select transmission TextDisp 1/Ra Profile Limit Alfa Defocus val Free
Standardize - OutFiles O Asc O Ras O TXT2 O TXT Search minimum Rp%(Cubic only) ValueODF-B ValuODF-A Cancel Calc ODF File

バックグランドのみ削除 Calc

計算されたTXT2ファイルをdefocusファイルとして選択

ODFPolefigure1.5 1.27T[17/03/31] by CTR		×
File Linear(3D) ToolKit Help InitSet Rp%	ファイルの場所(I): 📙 random 🗸 🤌 📂	.
Files select ASC(RINT-PC) Calcration Condition Previous Next C:#CTR#DATA#ODFPo	 defocus ủ 111_chFB0S_2 200_chFB0S_2 違 220_chFB0S_2 	
Backgroud delete mode DoubleMode OSingleMode AbsCalc Schulz reflection method	TUTT	
Detocus file Select TXT2 Standardize - OutFiles	الله الله الله الله الله الله الله الله	
Asc O Ras TXT2 C	PC	
Filemake success !!	マテイル名(N): I1_chFB0S_2.TXT [*] [*] 200_chFB0S_2.TXT [*] [*] 220_chFB0S_2.TXT [*] ネットワーク ファイルのタイプ(T): *txt*.Txt*.TXT ~	】

defocusTABLEとして登録されます

	Schulz re	eflection met	hod V Absorption coefficien 133.0 1/cm	Thickness U
Detoc	cus file Sel	ect		
	2	TXT2	C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random¥defocus¥DEFOCUS_F.TXT	
Stand	lardize – i r 🤇	DutFiles —		

2. 配向データの極点処理

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

M ODFPolefigure1.5 1.27T[17/03/31] by CTR -	×
File Linear(3D) ToolKit Help InitSet Rp%	
Files select ASC(RINT-PC) I1-OSC.ASC 200-OSC.ASC 220-OSC.ASC	
Calcration Condition Smoothing Previous Next C:#CTR#DATA#0 DFPoleFigure#111-OSC.ASC 1,1,1 Change Cycles 2 v Weight 9 v Disp	
Backgroud delete mode	51
O DoubleMode O SingleMode O LowMode O HighMode O Nothing Set Disp Dis	
Hosciela Schulz reflection method V Absorption coefficien 133.0 1/cm Thickness 0.2 cm 2Theta 38.42 deg. () 1/Kt Profile	
Uetocus tile Select Image: Cartering of the select	
Standardize OutFiles	
バックグランド除去、RD補正 (-5)、defocus補正、Rp%Searchを指定して Calc	



Search Rp% (1,1,1) 2.69% -> 1.74% (2,0,0) 3.08% -> 3.13% (2,2,0) 3.22% -> 2.99% Filemake success!!



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。 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。

M ODFPolefigure1	.5 1.27T[17/03/31] by CTR	
File Linear(3D)	ToolKit Help InitSet Rp%	
Files select ASC(RINT-PC)	PFtoODF3)-OSC.ASC 2:
Calcration Conditio	SoftWare	iauro¥111-0.Si
	ImageTools	igure∓111-03
Backgroud delete	PopLATools	O LowMode
AbsCalc	ODFAfterTools	ption coeffieie
Defocus file Selec	PoleOrientationTools	
	DataBacoToolo	sure¥random¥c



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



CalcでODF 解析がstart



ODF図

ODFDisplay2

ODFDisplay2 1.41YT[17/03/31] by CTR —	\times
File RoeModeEnable Help 3dispODF OtherODF Cubic	
_ODF	
☑ LaboTex	
ODFTXTFile(or ODF15)	
C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥CTRODF¥ODF.TXT	
Contour(Max=40)	
ODFMax= 12.95507 DispMax 12 Steplevel 1 Number=12	
Sample Symmetry(ϕ 1)	
Display-	
Bunge Roe	
Phi1 Phi2 PHI Phi1 ORINT all	
Smoothing	
□ Cycle 1 ✓ Center points 9 ✓ Display	



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。

ODFPoleFigure1.5->ToolKit->ODFAfterTools

ODFAfterTools 1.11XT[17/03/31]	- 🗆 >	
File Help		
LaboTex,TexTools,STD,NEWO ODFExport file	ValueODF	in-out-Polefigure compare
LaboTex(POD) VolumeFraction file	ODFVFGraph	Circle graph disp
LaboTex(POD) Volume Fraction files	CompareVolumeFraction	Circles graph disp
LaboTex,TexTools,STD,popLA ODFExportFile	ODFDisplay	Contour & fcc bcc fiber disp
ODFFiber TXT ODFDisplay export files	FiberMultiDisplay	ODF fiber files dsiplay
LaboTex ODF export file	ODFEulerAngle	ODF maxF EulerAngle (hkl)[uvw]
ReCalc PoleFigure File Export PoleFigure file	MakePoleFile	TXT2,TXT,ASC
TXT2 PoleFigure-3D-Display	GPPoleDisplay	3D-PoleFigure-Display
InverseData ODFInverseData	ODFInverseChecker	3D-Inverse-Display
ODFExportFile LaboTex ODF Export files(TXT)	CompareODF	ODFDisplay2
LaboTex ODFExportFile	GPODFDisplay	Contour Disp
TXT2 ODFEXport,PFConection	PFRotation	TXT,TXT,ASC
LaboTex,TexTools,STD,NEWO ODF Export file	ValueODFVF	in-out Polefigure compare
TXT2 Contour Display	PoleFigureContourDisplay	Contour Display

{0 1 2}<1 0 0> Q1

C

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





0.0

26.57

0.0

2.62

各種結晶方位密度が 表示されます。

ODFPoleFigure1.5->ToolKit->InverseTools

🔏 ODFPolefigure	.5 1.27T[17/03/3	31] by CTR	
ile Linear(3D)	ToolKit Help	InitSet Rp%	
Files select ASC(RINT-PC)	PFtoOD	F3	
Calcration Conditio Previous	SoftWar	e	
	ImageTo	ools	
Backgroud delete	PopLAT	ools	O Low
AbsCalc	ODFAfte	AfterTools	
Defocus file Selec	PoleOrie	entationTools	tationTools
	DataBas	BaseTools	
Standardize - Ou		ols	π
] <u>!</u>]	Standard	dODFTools	
	Defocus	Tools	
	ClusterT	rools	
	InverseT	Fools	

InverseTools 1.10XT[17/03/31] by CTR \times File Help Asc ProfiletoDivisionProfile DivisionProfile(index) Asc Profile(or Division) Asc InverseAll Inverse TXT File DivisionProfile(Index) TXT MeasureDatatoMYICDD MYICDD data HKL Intens 2Theta TEXT data InverseTXT -InverseDisplay Inverse 3D Display Inverse Data -InverseTXT • InverseDisplayHexa Hexalnverse 3D Display Hexalnverse Data Asc Lotgering Method Text Data Profile Asc(files) Lotgering and Inverse Text Data Profiles ODF-Inverse InverseDirection Direction-Plane Data disp Inverse Data ODF-Inverse GPInverseDisplay Inverse 3D Display Inverse Data -Inverselist -InverseContour Display InverseCubicContourDisplay Inverse Data -Inverselist -InverseContourDisplay InverseContour Display Inverse Data je -Inverselist InverseDisp2 InverseDisplay36Box Inverse Data 10

Contour Display

InverseDisp2

C:\TR\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ソフトウエア説明書を参照してください。 ODFPoleFigure1.5->ToolKit->ODFAfterTools

GPODFDisplay

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



マウスを、ODP 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
```

GPInverseDisplay 1.04T[17/03/31] by CTR	
le Help	
A-Iron-Measure-IntegralData.TXT a 1.0 b 1.0 c 1.0	α 90.0 β 90.0 γ 90.0
Labolex □ popLA □ StnadredODF □ TexTools □ Other	
Method Miller Nortation(3 Avis Nortation)	Plane max index Direction max ind
Inverse data select	
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\CTRODF\Inverse.TPF	List ND ~
Inverse Display—	
6.83 2D V 0.3 < 1.0 800 Ft	Ill Inverse disp Inverse data
Peak data Other font size C	contourDisplay
Level 6	Peak serach Inverse Disp
Full Inverse disp Inverse data ContourDis	splay Ver the let
	ney 课作
InverseCubicContourDisplay 1.06T[17/03/31] by CTR	- <u> </u>
Help View 36BOX	
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\CTRODF\Inverselist.TXT	Max=6.83 Min=0 0
	6.5
[111]	5.5
\land	4.5 4.0 3.5
	30 25 25
	2.0 1.5 1.0
	0.5
	-
A l	
$\langle \chi \rangle$	
\checkmark	-
-43.8 , φ=28.1) Z=0.49> [3,3,8]	

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。