

特許明細書にEBSD利用の面積率をXRDソフトウェアで
方位に対する面積率をXRDODFで解析

2022年07月27日

HelperTex Office

概要

E B S D利用した明細書には面積率を利用したケースが多い

//ND

板厚方向に対する前記 α 相の[0001]方向のなす角が 0° 以上 40° 以下の結晶粒の面積率が 70% 以上である、チタン合金板。

//ND

前記カラーマップにおいて、

前記上側部は、(006)面の法線方向が前記第二界面の法線方向に対して $\pm 15^\circ$ 以内となる前記 α -アルミナの結晶粒の占める面積比率が 50% 以上であり、

前記下側部は、(110)面の法線方向が前記第二界面の法線方向に対して $\pm 15^\circ$ 以内となる前記 α -アルミナの結晶粒の占める面積比率が 50% 以上であり、

前記下側部は、(214)面の法線方向が前記第二界面の法線方向に対して $\pm 15^\circ$ 以内となる前記 α -アルミナの結晶粒の占める面積比率が 21% 以下であり、

//RD

圧延方向の結晶方位 RD//<100>分率が 0.5 以下であるフェライト系ステンレス棒状鋼材。ただし、圧延方向の結晶方位 RD//<100>分率とは、<100>方位と圧延方向との角度差が 20° 以下である結晶の面積比率を意味する。

{hkl}<uvw>

EBS D(電子線後方散乱回折法)測定において、S 方位{2 3 1}<3 -4 6>からの結晶方位差が 10° 以内である領域の面積を AS、R 方位{1 3 2}<4 -2 1>からの結晶方位差が 10° 以内である領域の面積を AR、P 方位{0 1 1}<1 -1 1>からの結晶方位差が 10° 以内である領域の面積を AP、Cube 方位{0 0 1}<1 0 0>からの結晶方位差が 10° 以内である領域の面積を AC とするとき、下記(1)式に従う A 値が $0.5 \sim 20$ である銅合金板材。

$$A=(AS+AR)/(AP+AC) \dots(1)$$

//ND

前記六方最密充填構造を有する結晶の(0001)面の法線を c 軸としたとき、板面の法線方向から 40° 以内の角度に前記 c 軸が傾いた結晶粒の、すべての結晶粒に対する面積率が、 70% 以上

//ND

{001}面が電磁鋼板の板面と誤差範囲 15° 内で平行をなしている組織の分率が 25% 以上である、無方向性電磁鋼板。

特定方位から α 角度範囲の面積率

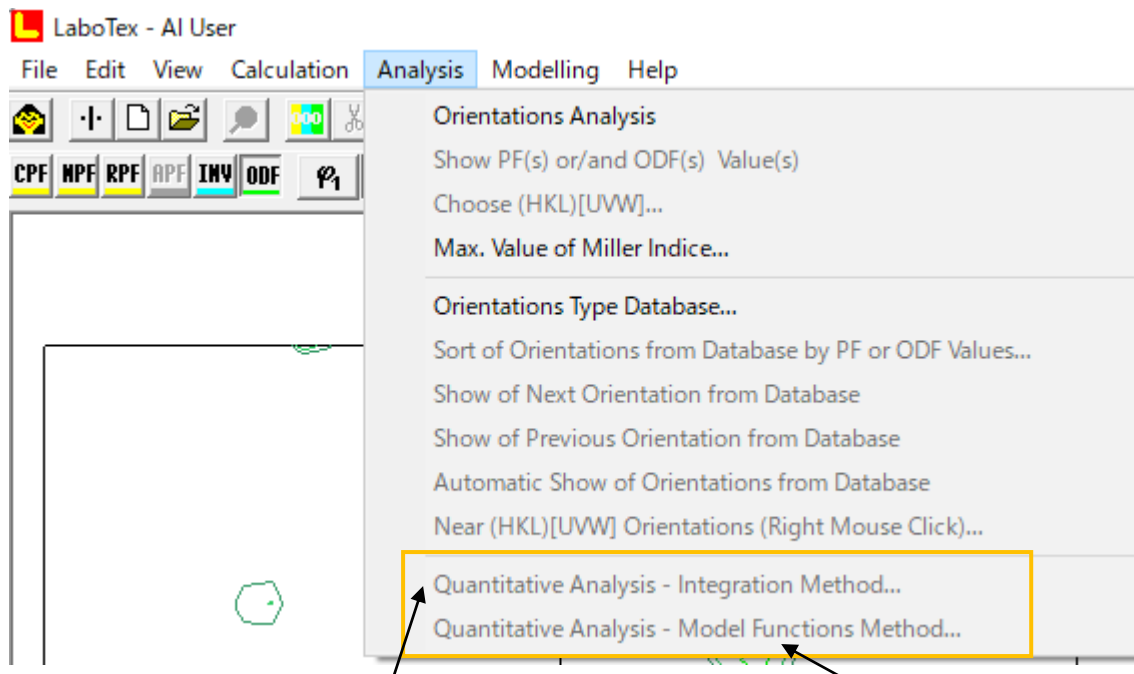
< h k l > //NDから α 角度範囲の面積率

< h k l > //RDから α 角度範囲の面積率

< k h l > //TDも考えられる

XRDでは方位の定量はV o l i m e F r a c t i o n (体積率) と言われている。

市販ODFソフトウェアによるVolume Fraction LaboTex



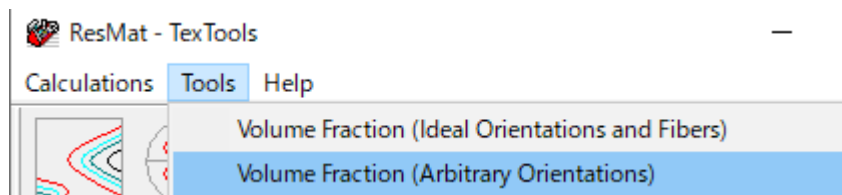
E B S Dを含む他のODFと同じ手法

L a b o T e x 独自の方法

M T E X

```
v = volume(odf,center,radius)
v = volume(odf,fibre,radius) % gives the volume with a fibre
```

T e x T o o l s



個々の方位に関して比較を行ってみます。

M T E X で方位を作成し、完全極点図を E x p o r t し、個々の O D F ソフトウェアで解析を行う。

L a b o T e x は軸方向解析では // N D のみサポートしているので

// R D は R D → N D 変換を行って計算する。

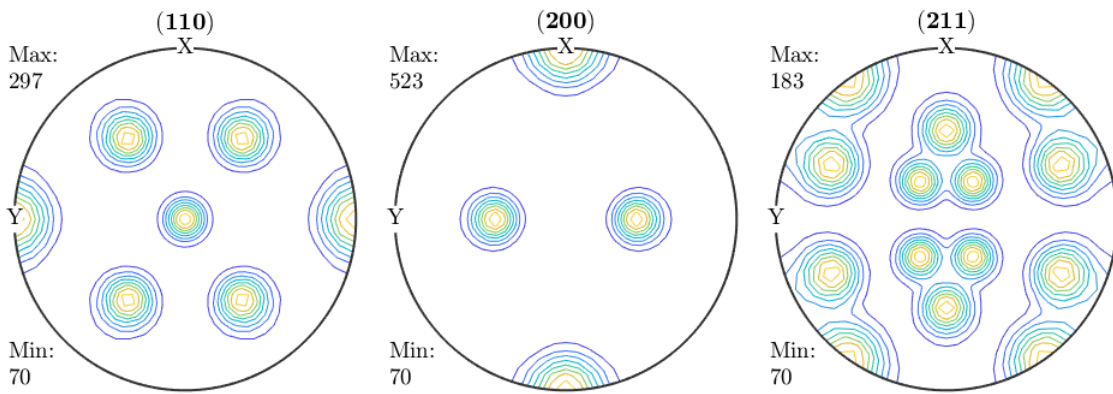
B O X 計算は r a n d o m が含まれていると、V F % は大きくなります。

O D F 図における r a n d o m は O D F 値のバックグラウンドで底上げされています。

```

G o s s 方位 3 0 % + r a n d o m 7 0 %
cs = crystalSymmetry('cubic')
ss= specimenSymmetry('triclinic')
odfr = uniformODF(cs,ss)
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',10*degree)
ori = orientation.byMiller([1,1,0],[0,0,1],cs,ss)
odfg = unimodalODF(ori,psi)
odf=30*odfg+70*odfr
h = { Miller(1,1,0,cs), Miller(2,0,0,cs),Miller(2,1,1,cs)}
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
plot(rpf,'contour','projection','eangle')

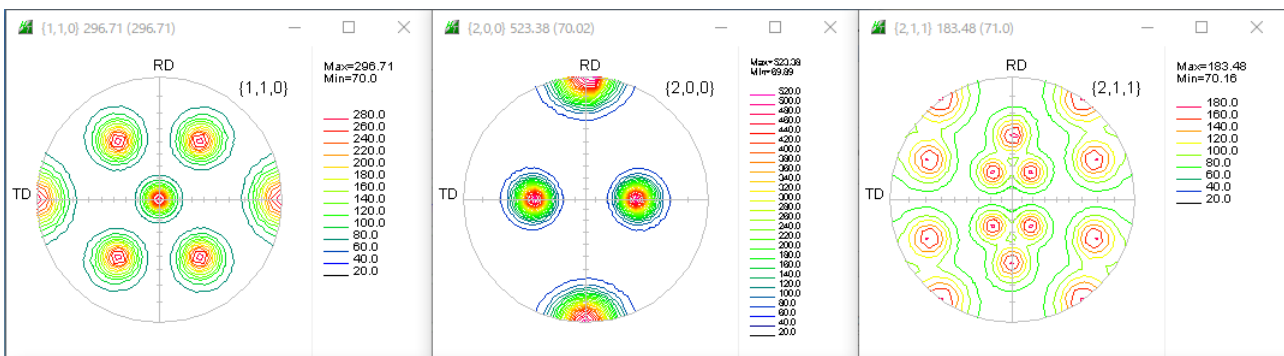
```



Min : 70 は randomが70%を示しています。

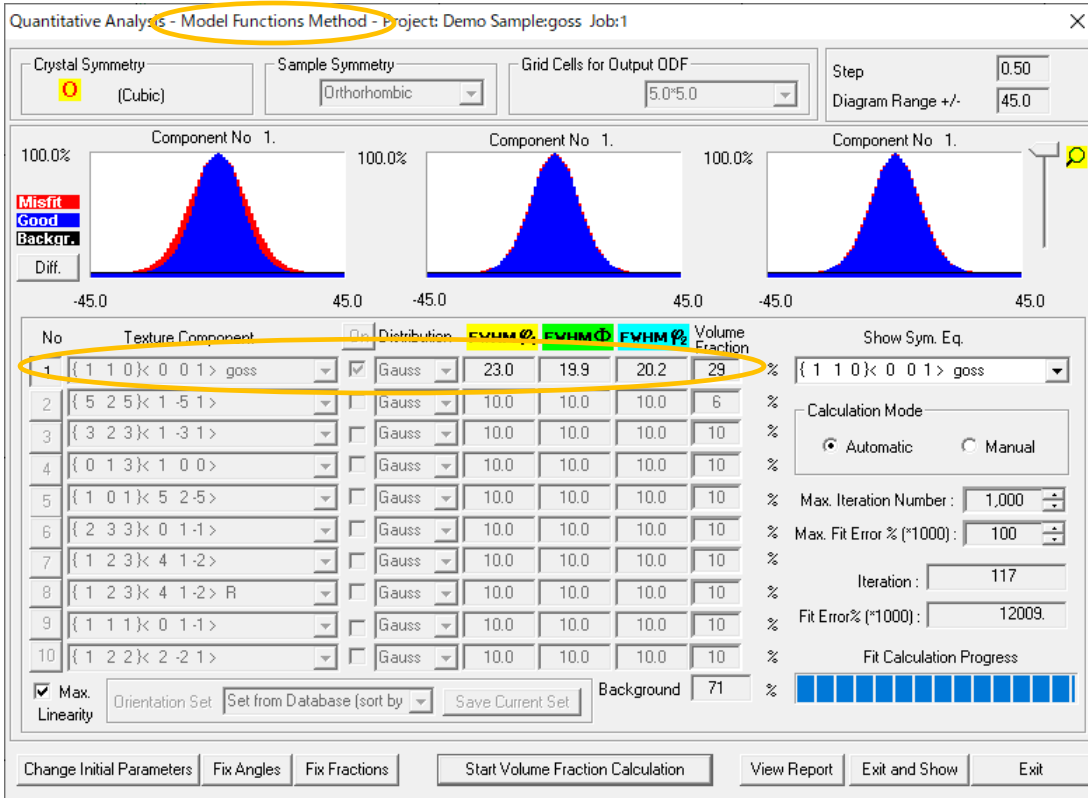
```
export(rpf,'pole')
```

Exportされた極点図



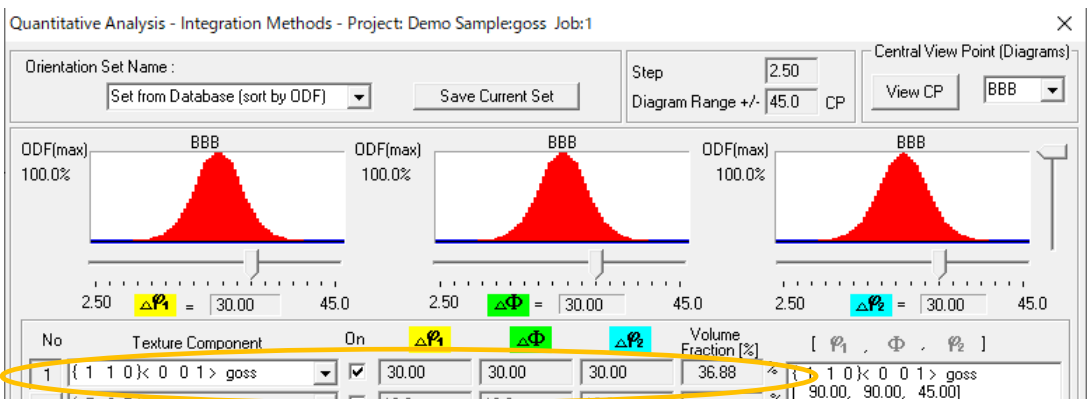
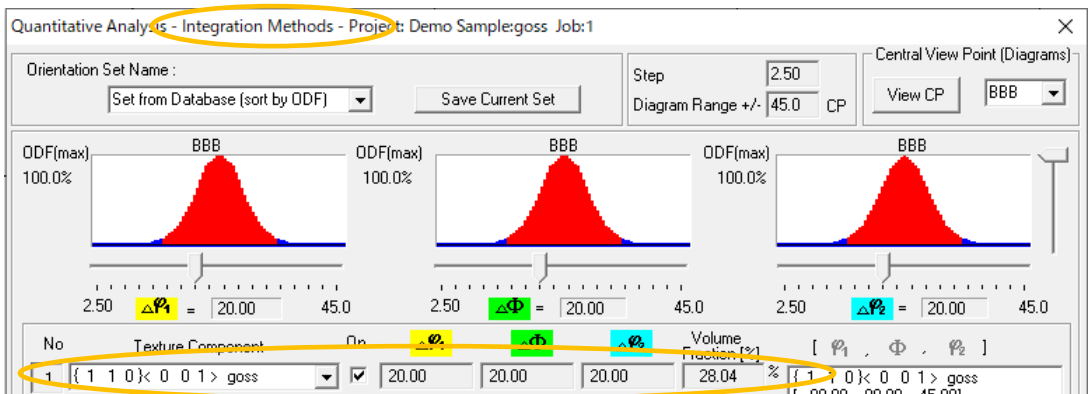
LaboTeXで解析

関数近似(独自の方法)



randomは除外して解析されている

EBSD解析と同じBOX手法



randomも含まれてしまう。

MTEXで解析 (BOX)

20deg

```
>> v=volume(odf,orientation.byMiller([1,1,0],[0,0,1],cs,ss),0.349)
```

v =

0.2865

30deg

```
>> v=volume(odf,orientation.byMiller([1,1,0],[0,0,1],cs,ss),0.523)
```

v =

0.4110

LaboTexのBOXモードと同じようにrandomが含まれる。

TexTools

Orientation Volume Fraction dialog box. The "Ideal Orientations" section is selected. The "Goss component" is chosen. ϕ_1 is 0, Φ is 45, and ϕ_2 is 0. The tolerance is set to 20 degrees. The "Fibers" section is unselected. The "gamma fiber (phi = 55, phi2 = 45)" is chosen. The h, k, and l values are all 1. The tolerance is 15 degrees. The ODF File Name is U:\2022-07-27-VF\Goss\TexTools\GV.HODF. The Result field shows Goss=8.91%. A blue progress bar is visible at the bottom.

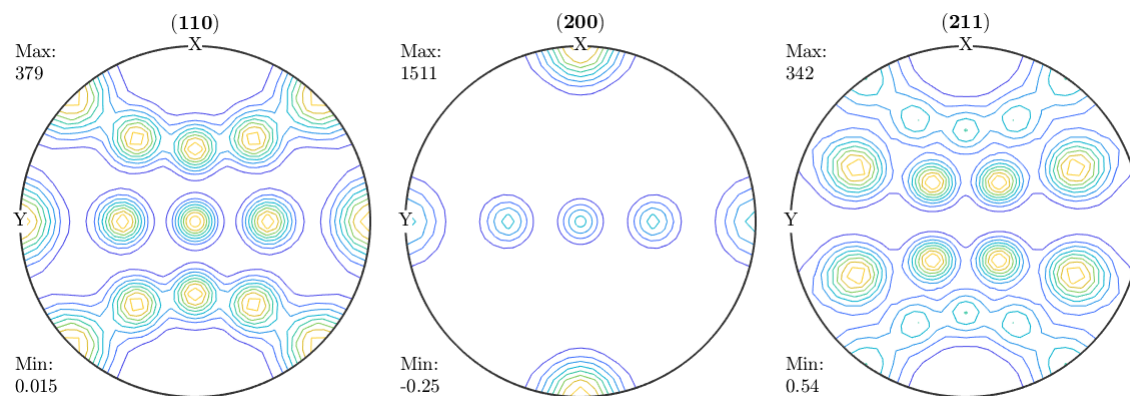
Orientation Volume Fraction dialog box. The "Ideal Orientations" section is selected. The "Goss component" is chosen. ϕ_1 is 0, Φ is 45, and ϕ_2 is 0. The tolerance is set to 30 degrees. The "Fibers" section is unselected. The "gamma fiber (phi = 55, phi2 = 45)" is chosen. The h, k, and l values are all 1. The tolerance is 15 degrees. The ODF File Name is U:\2022-07-27-VF\Goss\TexTools\GV.HODF. The Result field shows Goss=17.99%. A blue progress bar is visible at the bottom.

Orientation Volume Fraction dialog box. The "Ideal Orientations" section is selected. The "Goss component" is chosen. ϕ_1 is 0, Φ is 45, and ϕ_2 is 0. The tolerance is set to 40 degrees. The "Fibers" section is unselected. The "gamma fiber (phi = 55, phi2 = 45)" is chosen. The h, k, and l values are all 1. The tolerance is 15 degrees. The ODF File Name is U:\2022-07-27-VF\Goss\TexTools\GV.HODF. The Result field shows Goss=36.71%. A blue progress bar is visible at the bottom.

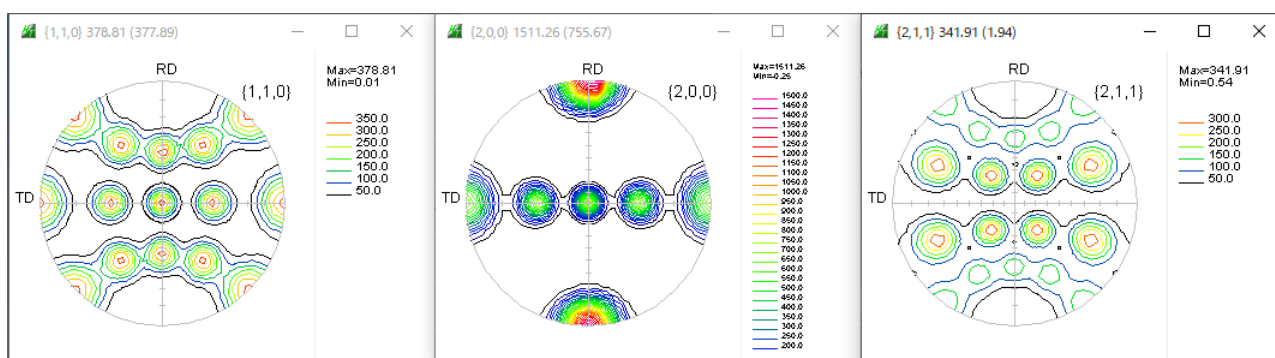
角度指定が広い

G o s s 5 0 % + C u b e 5 0 % (r a n d o m な し)

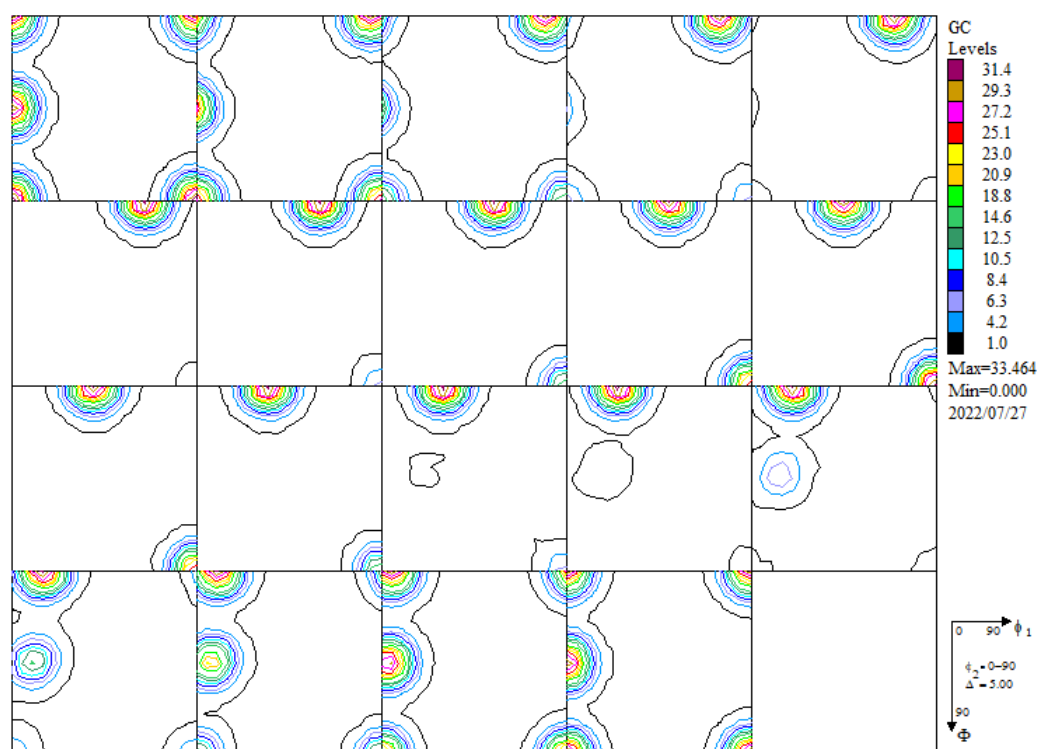
計算された極点図



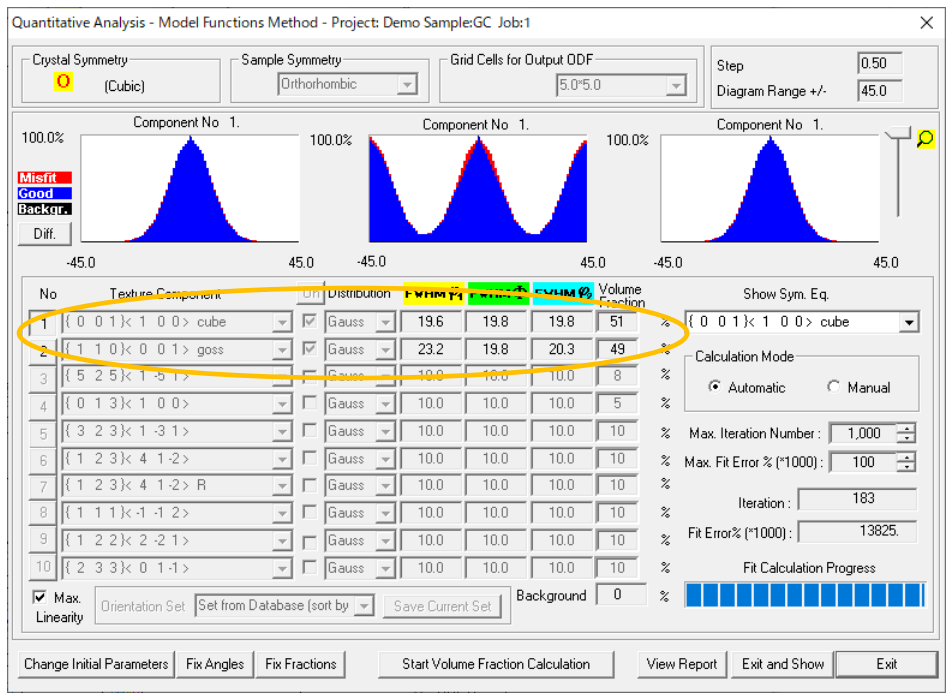
E x p o r t された極点図



L a b o T e x によるODF解析

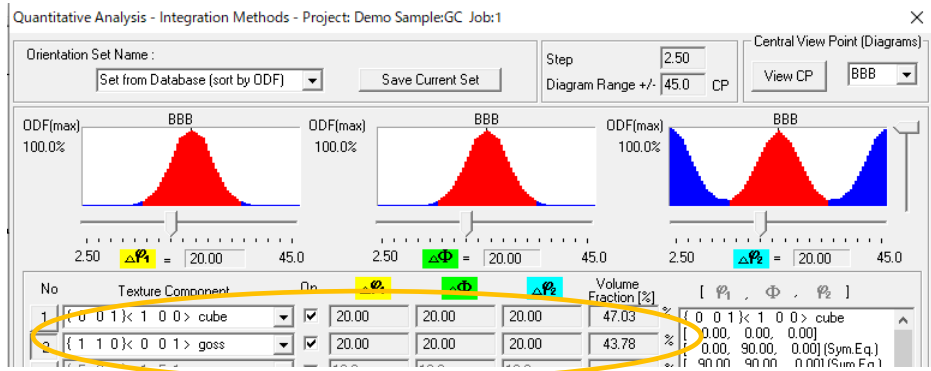


LaTeXによるVF%

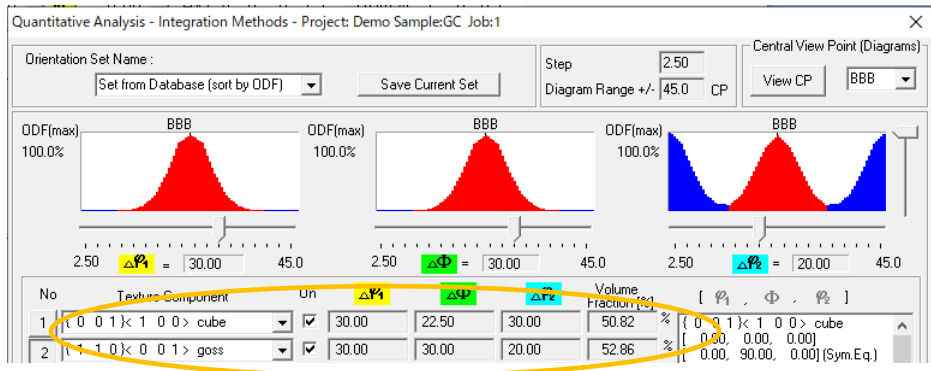


euler角度の広がりは自動的に計算され、良い結果が得られる

20deg



30deg (プロファイルから制限を含む)



範囲が示され、扱いやすく、良い結果が得られる。

TexTools

20deg

Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Goss component

ϕ_1 0 Φ 45 ϕ_2 0

Tolerance (degree) 20

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

gama fiber (phi = 55, phi2 = 45)

h 1 k 1 l 1


Tolerance (degree) 15

ODF File Name U:\2022-07-27-VF#Goss-Cube#TexTools#GC.HODF >>

Result: Goss=43.52%

Calculate

Cancel



Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Cube component

ϕ_1 0 Φ 0 ϕ_2 0

Tolerance (degree) 20

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

gama fiber (phi = 55, phi2 = 45)

h 1 k 1 l 1


Tolerance (degree) 15

ODF File Name U:\2022-07-27-VF#Goss-Cube#TexTools#GC.HODF >>

Result: Cube=43.23%

Calculate

Cancel



30deg

Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Goss component

ϕ_1 0 Φ 45 ϕ_2 0

Tolerance (degree) 30

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

gama fiber (phi = 55, phi2 = 45)

h 1 k 1 l 1


Tolerance (degree) 15

ODF File Name U:\2022-07-27-VF#Goss-Cube#TexTools#GC.HODF >>

Result: Goss=51.26%

Calculate

Cancel



Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Cube component

ϕ_1 0 Φ 0 ϕ_2 0

Tolerance (degree) 30

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

gama fiber (phi = 55, phi2 = 45)

h 1 k 1 l 1


Tolerance (degree) 15

ODF File Name U:\2022-07-27-VF#Goss-Cube#TexTools#GC.HODF >>

Result: Cube=51.61%

Calculate

Cancel



LaboTexのようなFWHMの指標がかく、指定が難しい

MTEX

20 deg

```
>> v=volume(odf,orientation.byMiller([1,1,0],[0,0,1],CS,SS),0.349)
```

v =

0.4105

```
>> v=volume(odf,orientation.byMiller([1,0,0],[0,0,1],CS,SS),0.349)
```

v =

0.3978

30 deg

```
>> v=volume(odf,orientation.byMiller([1,1,0],[0,0,1],CS,SS),0.523)
```

v =

0.5010

```
>> v=volume(odf,orientation.byMiller([1,0,0],[0,0,1],CS,SS),0.523)
```

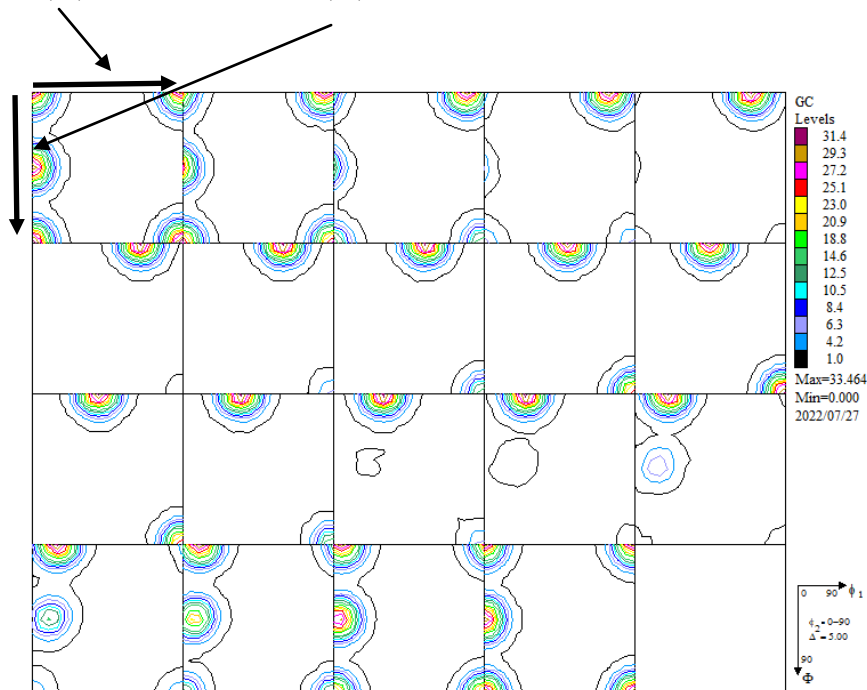
v =

0.4870

MTEXの解析結果のFWHMは常に同一のため、30 deg 固定できる。

Goss 50%+Cube 50

$\langle 001 \rangle // ND$ と $\langle 001 \rangle // RD$

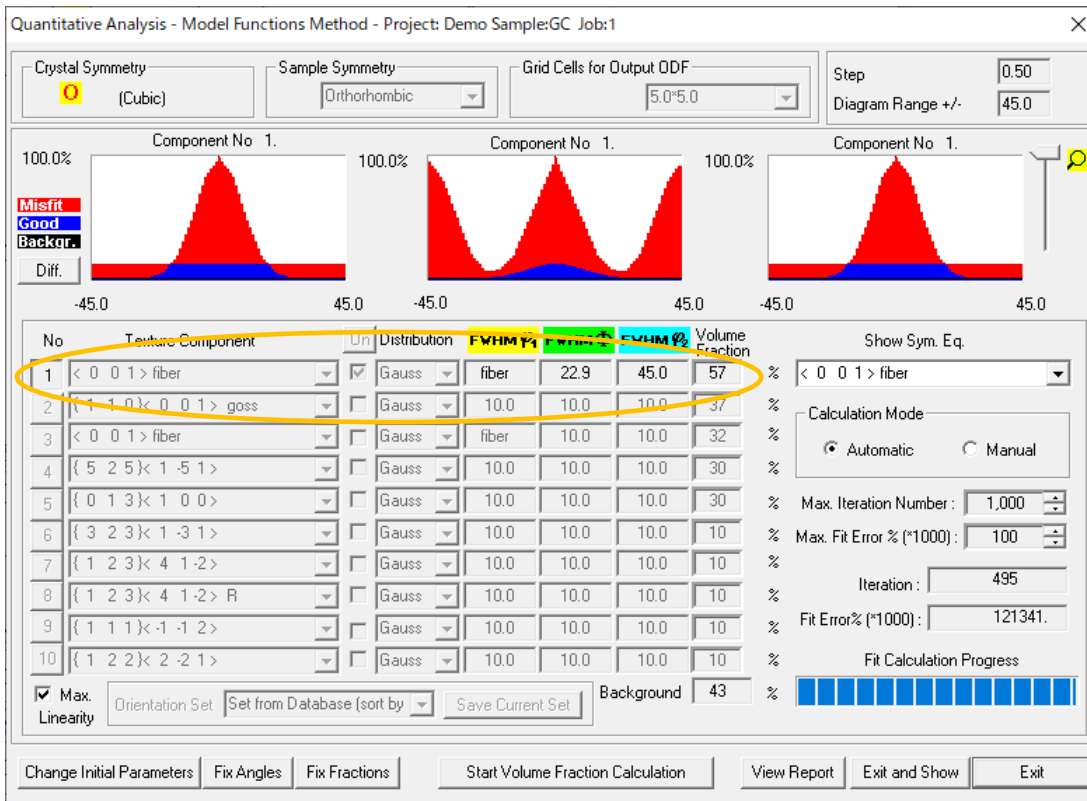


$\langle 001 \rangle // ND$ のVF = 50%

$\langle 001 \rangle // RD$ のVF = 100%

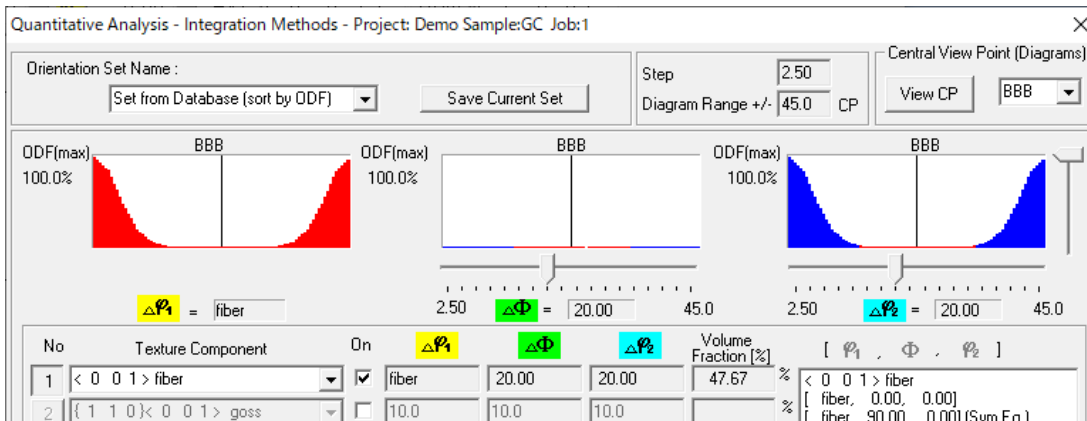
G o s s 5 0 % + C u b e 5 0 % を $\langle 0 0 1 \rangle // ND$ で計算 VF % = 5 0 %

L a b o T e x

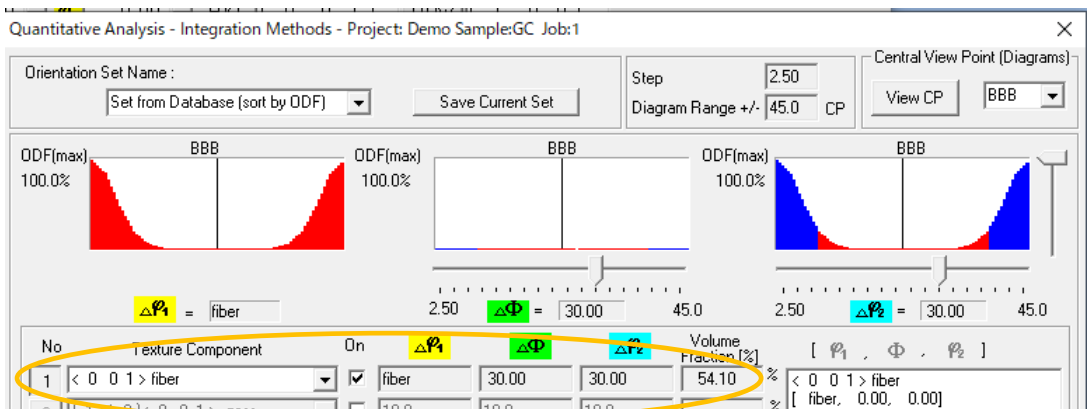


ϕ 方向に広がり VF % = 5 7 % > 5 0 %

BOXで20deg



BOXで30deg



TextTools
20deg

Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Cube component

ϕ_1 0 Φ 0 ϕ_2 0

Tolerance (degree) 15

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

{hkl} perpendicular to ND

h 1 k 0 l 0

Tolerance (degree) 20

ODF File Name U:\2022-07-27-VF#Goss-Cube#TexTools#GC.HODF >>

Result: 47.51%

Calculate

Cancel

30deg

Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Cube component

ϕ_1 0 Φ 0 ϕ_2 0

Tolerance (degree) 15

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

{hkl} perpendicular to ND

h 1 k 0 l 0

Tolerance (degree) 30

ODF File Name U:\2022-07-27-VF#Goss-Cube#TexTools#GC.HODF >>

Result: 53.19%

Calculate

Cancel

MTEX

20deg

$v = \text{fibreVolume}(\text{odf}, \text{Miller}(0,0,1, \text{CS}), \text{vector3d.Z}, 0.349)$

$v = 0.4415$

30deg

$v = \text{fibreVolume}(\text{odf}, \text{Miller}(0,0,1, \text{CS}), \text{vector3d.Z}, 0.523)$

$v = 0.5249$

Go s 5 0 % + C u b e 5 0 % の $\langle 001 \rangle // RD$ を計算 VF% = 100%

L a b o T e x は RD \rightarrow ND 変換し $\langle 001 \rangle // ND$ で計算

ODF Transformation (Rotation) X

Project: Demo Sample: GC

Crystal Symmetry: **C** (Cubic) Sample Symmetry: Orthorhombic

Sample Frame Rotation Crystallites/Planes Rotations

Euler Angles: φ_1 Φ φ_2
 (-360 - 360) (-180 - 180) (-360 - 360)
 90 90 90

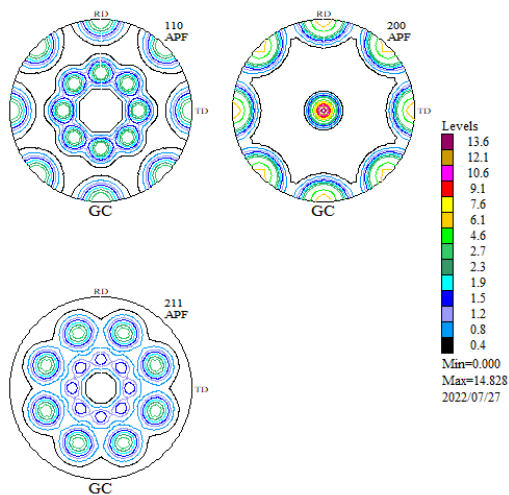
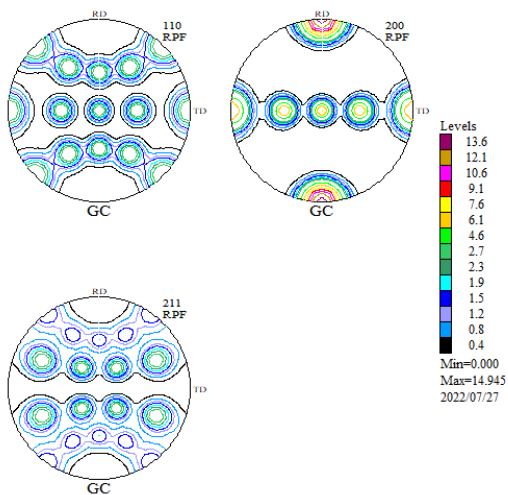
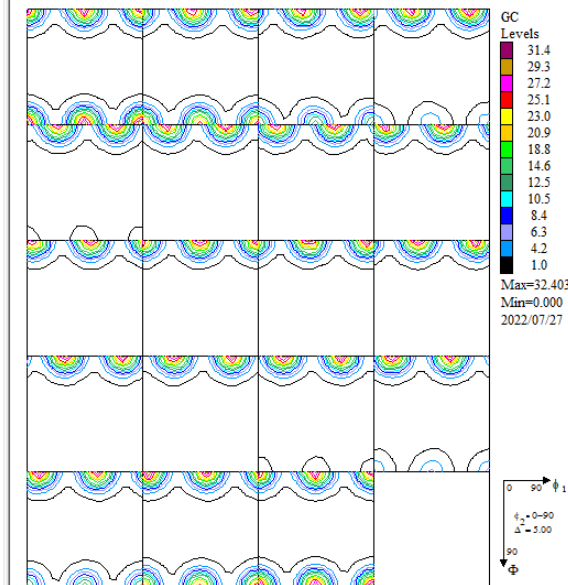
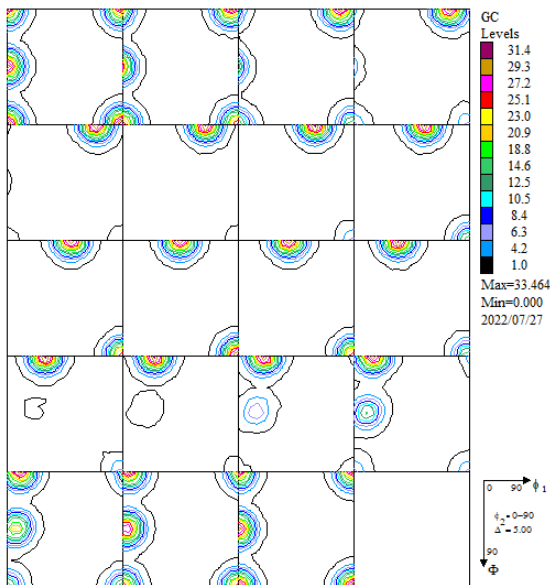
Build Rotations Model

Choose Rotation Model

Options:
 Draft Medium Quality High Quality
 Reversed Spin Triclinic s.s. (Output ODF)

START Cancel

Transformation Progress: 0.00 %

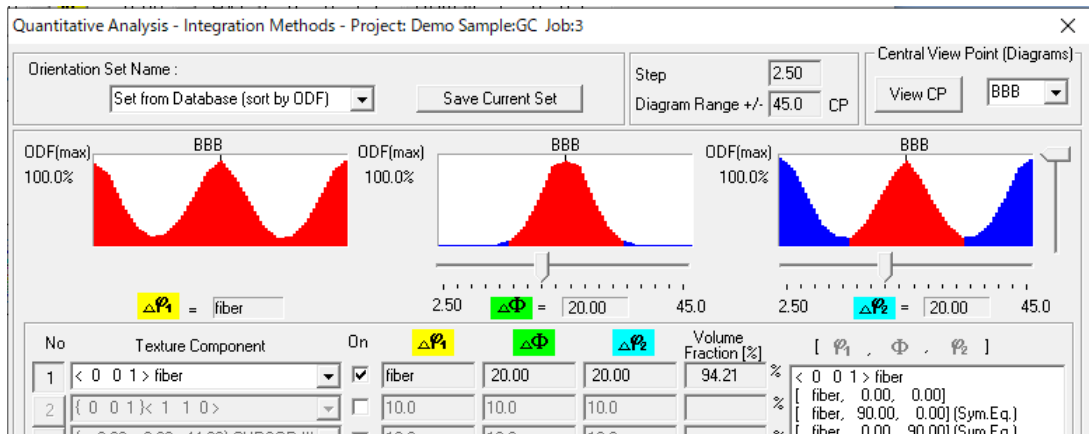


関数近似

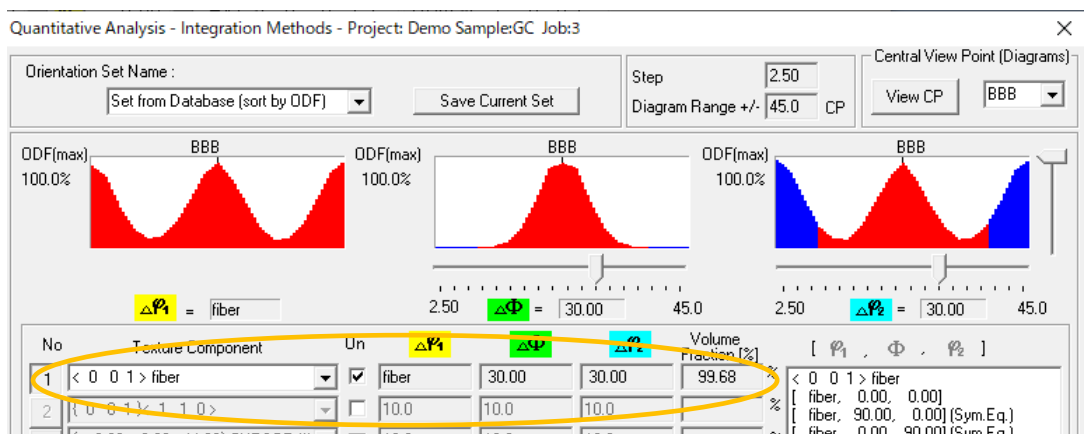


BOX

2 0 d e g



3 0 d e g



Textoolsで<001>//RDを計算

20deg

Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Cube component

$\phi 1$ 0 Φ 0 $\phi 2$ 0

Tolerance (degree) 15

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

$\{hk\}$ perpendicular to RD

h 1 k 0 l 0

Tolerance (degree) 20

ODF File Name U:\2022-07-27-VF\Goss-Cube\TexTools\GC.HODF >>

Result: 93.81%

Calculate Cancel

30deg

Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations

Cube component

$\phi 1$ 0 Φ 0 $\phi 2$ 0

Tolerance (degree) 15

With sample symmetrical orientations (4 fold)

Fibers

$\{hk\}$ perpendicular to RD

h 1 k 0 l 0

Tolerance (degree) 30

ODF File Name U:\2022-07-27-VF\Goss-Cube\TexTools\GC.HODF >>

Result: 99.51%

Calculate Cancel

MTEXで<001>//RDを計算

20deg

v=fibreVolume(odf,Miller(0,0,1,CS),vector3d.X,0.349)

v = 0.8912

30deg

v=fibreVolume(odf,Miller(0,0,1,CS),vector3d.X,0.523)

v = 0.9648

まとめ

EBS Dにおける面積率をXRDで実現する場合、通常のODF解析後
V o l u m e F r a c t i o n（体積率）を求める。

L a b o T e xでは自動のF u n c t i o n m o d eが使いやすい。

EBS Dと同様のBOXモードもFWHMの広がりが見られていて扱いやすい。

MTE Xでは、方位の広がりが見るため30deg固定で解析できる。

EBS Dで解析できない、粒形の大きい試料や圧延版などの広域平均データに応用できます。