

2022年07月17日

HelperTex Office

概要

材料の物理特性を極点測定から ODF 解析を行い、ODF の数値解析結果を請求項としているケースがあります。

本資料では、シミュレーションから極点図を作成し、各種ODF 解析ソフトウェアで評価してみます。

請求項

集合組織の最大ピーク方位が、Bunge のオイラー角表示で、

$\phi 1 = 90^\circ \pm 7.5^\circ$ 、 $\Phi : 58 \sim 62^\circ$ 又は -58 から -62° 、 $\phi 2 = 45^\circ \pm 7.5^\circ$ の範囲に存在し、かつ、 $\{1241\} \langle 014 \rangle$ の random 強度比が 3.0 以上

解説

XRD 極点図から ODF 解析を行い、

$\phi 1 = 90^\circ$ 、 $\phi = 45^\circ$ 、 $\Phi : 0^\circ$ から 90° は ϵ -Fiber で $\langle 110 \rangle // TD$
この Fiber 線の許容範囲 ($\phi 1 = 90^\circ \pm 7.5^\circ$ 、 $\phi 2 = 45^\circ \pm 7.65^\circ$) と制限範囲 ($\Phi : 58^\circ \sim 62^\circ$) に主方位を持ち、副方位が $\{1241\} \langle 014 \rangle$ で方位密度が 3.0 以上

シミュレーション

euler 角度の広がりを全ての方向に FWHM = 20 deg とし

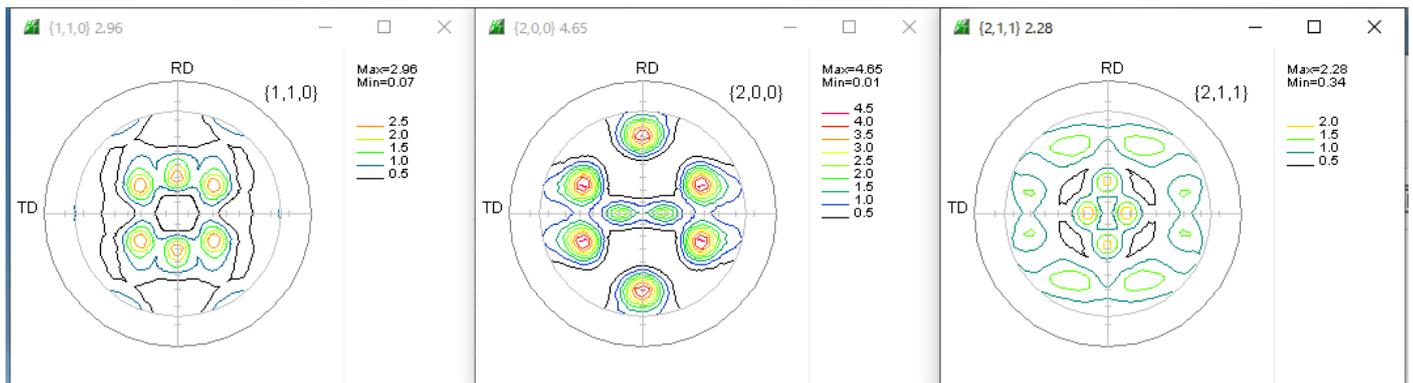
$\{554\} \langle 225 \rangle$ VF% = 60

$\{1241\} \langle 014 \rangle$ VF% = 30

$\{001\} \langle 110 \rangle$ VF% = 7

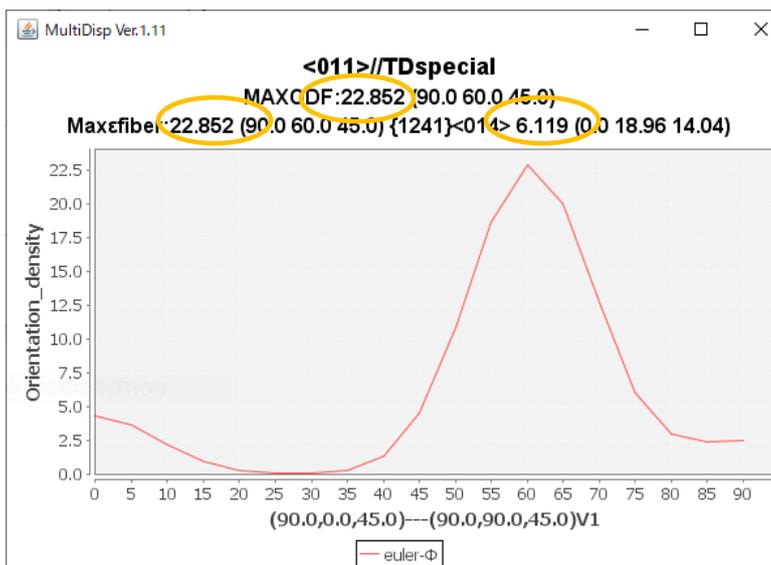
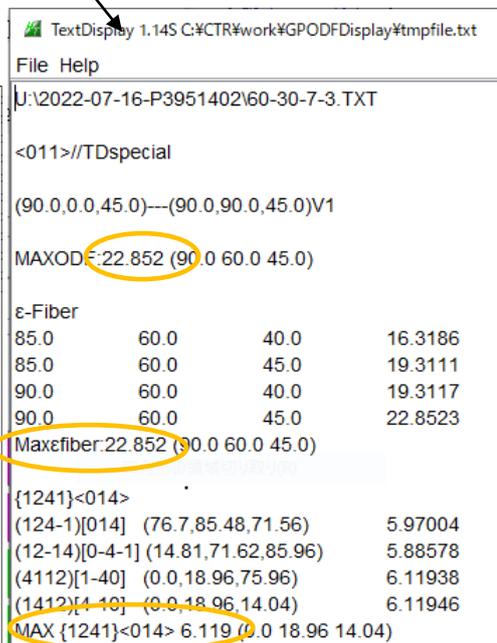
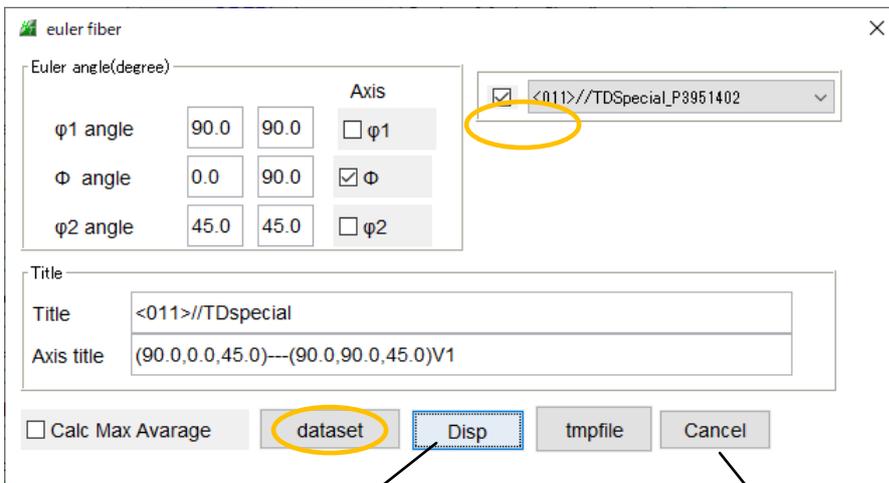
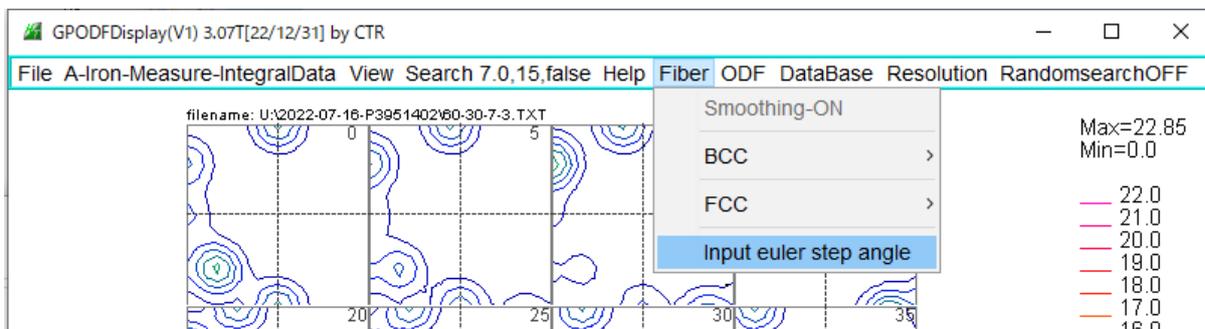
$\{110\} \langle 001 \rangle$ VF% = 3

から反射極点図を作成



各種ODFで解析を行い、ODF図をExportし比較する

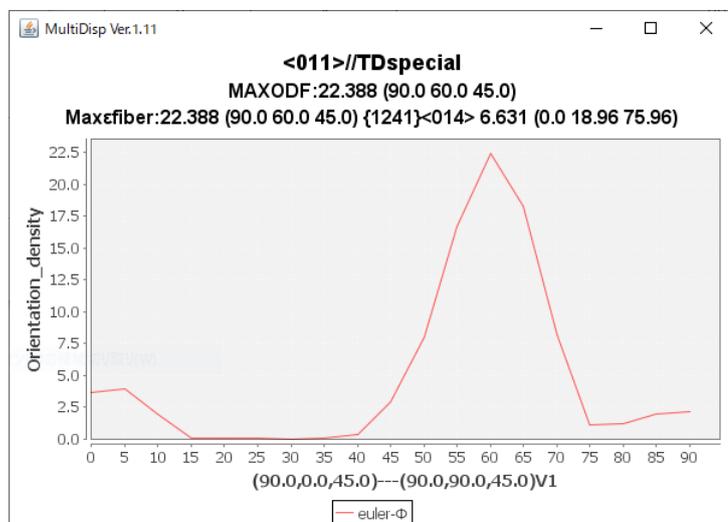
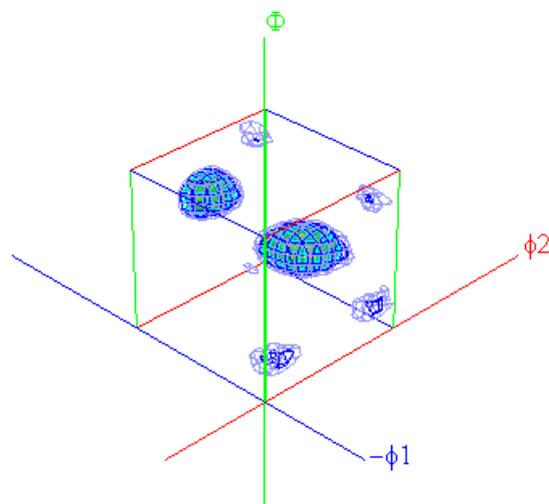
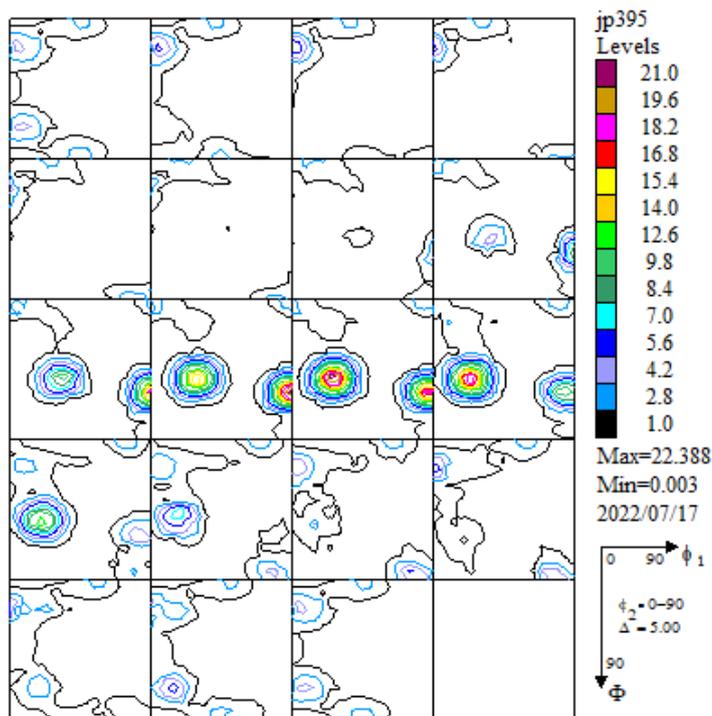
計算はGPODFDisplayソフトウェアのFiber解析で行う



最大方位密度 (MAXODF) と ϵ Fiber 制限内最大値が一致し

{1241} <014> の最大方位密度が 3.0 以上を確認する。

LaboTexで解析



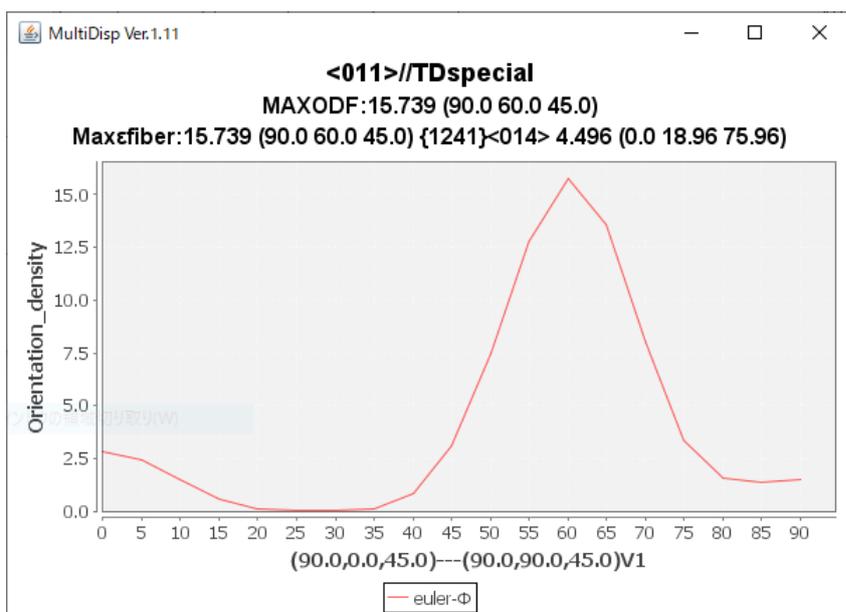
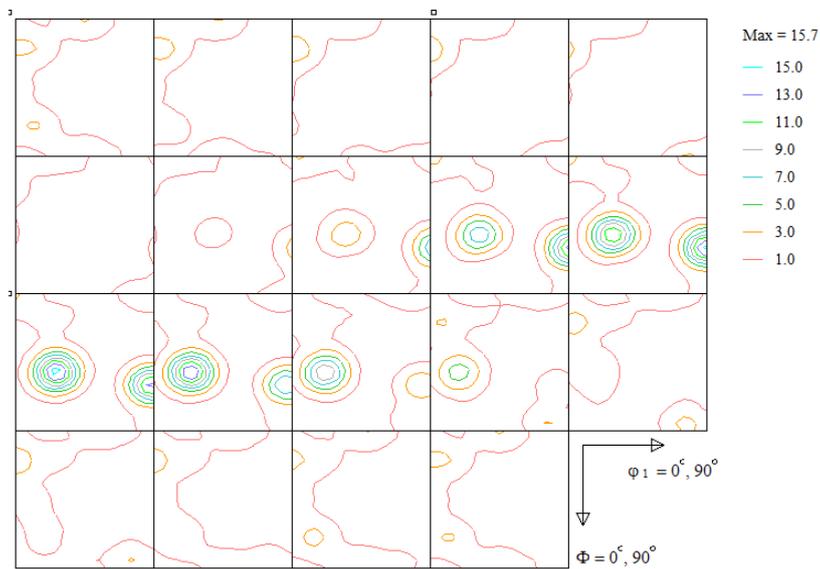
最大方位密度が制限付き<011>//ND内 22.388
{1241}<014> 6.631>3

J:\2022-07-16-P3951402\TXT2\LaboTex\CW\jp395.TXT

```

<011>//TDspecial
(90.0,0.0,45.0)---(90.0,90.0,45.0)V1
MAXODF:22.388 (90.0 60.0 45.0)
ε-Fiber
85.0      60.0      40.0      13.199
85.0      60.0      45.0      18.9478
90.0      60.0      40.0      18.2836
90.0      60.0      45.0      22.3876
Maxefiber:22.388 (90.0 60.0 45.0)
{1241}<014>
(124-1)[014] (76.7,85.48,71.56)      5.76097
(12-14)[0-4-1] (14.81,71.62,85.96)    6.28147
(4112)[1-40] (0.0,18.96,75.96)      6.63067
(1412)[4-10] (0.0,18.96,14.04)      6.63067
MAX {1241}<014> 6.631 (0.0 18.96 75.96)
    
```

TexToolsで解析



U:\2022-07-16-P3951402\TXT2\TexTools\IP395.HODF

<011>//TDspecial

(90.0,0.0,45.0)---(90.0,90.0,45.0)V1

MAXODF:15.739 (90.0 60.0 45.0)

ε-Fiber

85.0	60.0	40.0	10.763
85.0	60.0	45.0	13.8046
90.0	60.0	40.0	13.4307
90.0	60.0	45.0	15.7393

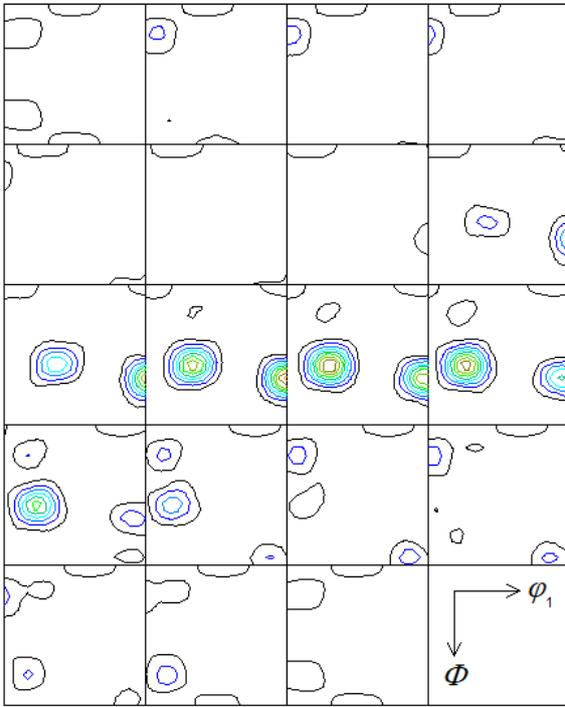
Maxfiber:15.739 (90.0 60.0 45.0)

{1241}<014>

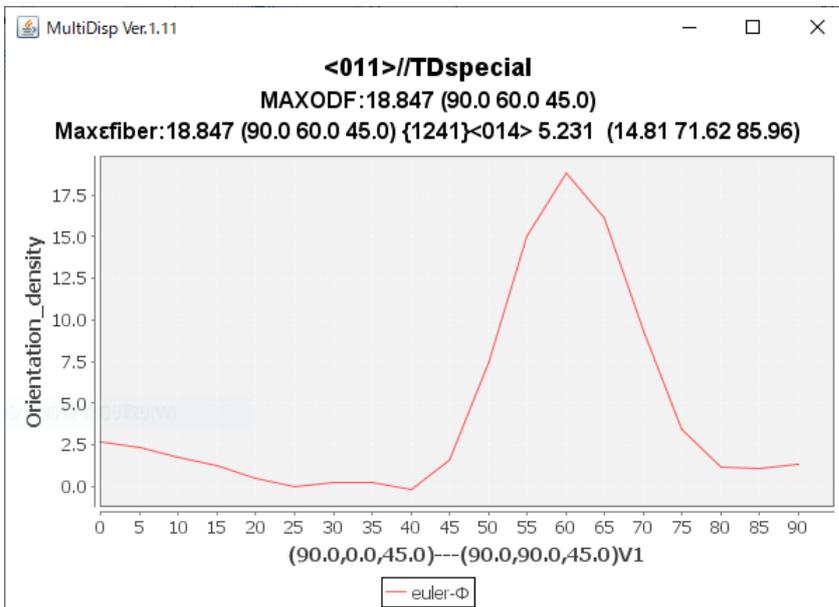
(124-1)[014]	(76.7,85.48,71.56)	3.5828
(12-14)[0-4-1]	(14.81,71.62,85.96)	3.6618
(4112)[1-40]	(0.0,18.96,75.96)	4.4956
(1412)[4-10]	(0.0,18.96,14.04)	4.4956
MAX {1241}<014>	4.496 (0.0 18.96 75.96)	

最大方位密度が制限付き<011>//ND内 15.739
{1241}<014> 4.496>3

StandardODFでは



Contour Levels: 2.0 4.0 6.0 8.0 10.0 12.0 14.0 16.0 18.0



J:\2022-07-16-P3951402\TXT2\StandardODF\ODF15

<011>//TDspecial

(90.0,0.0,45.0)--(90.0,90.0,45.0)V1

MAXODF:18.847 (90.0 60.0 45.0)

ε-Fiber

85.0	60.0	40.0	11.947619438171387
85.0	60.0	45.0	16.29442024230957
90.0	60.0	40.0	15.856115341186523
90.0	60.0	45.0	18.846607208251953

Maxfiber:18.847 (90.0 60.0 45.0)

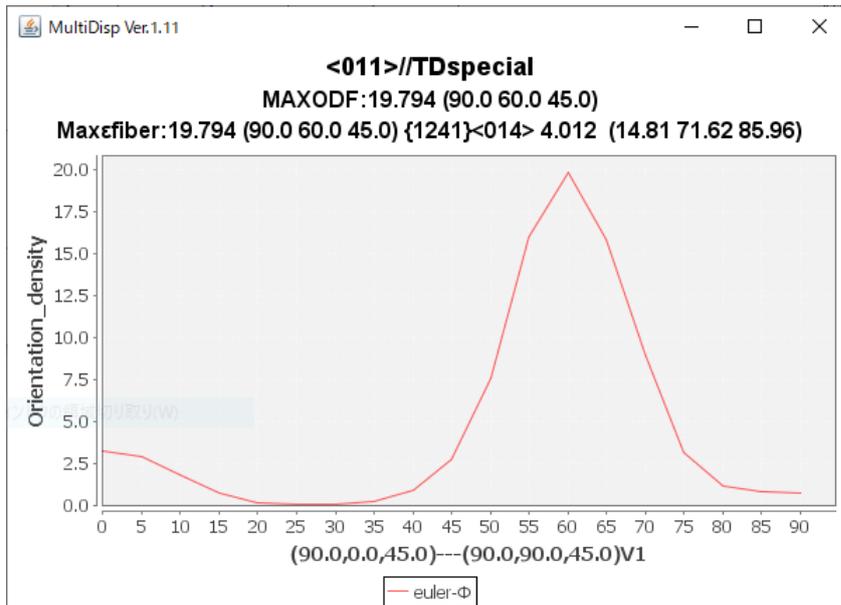
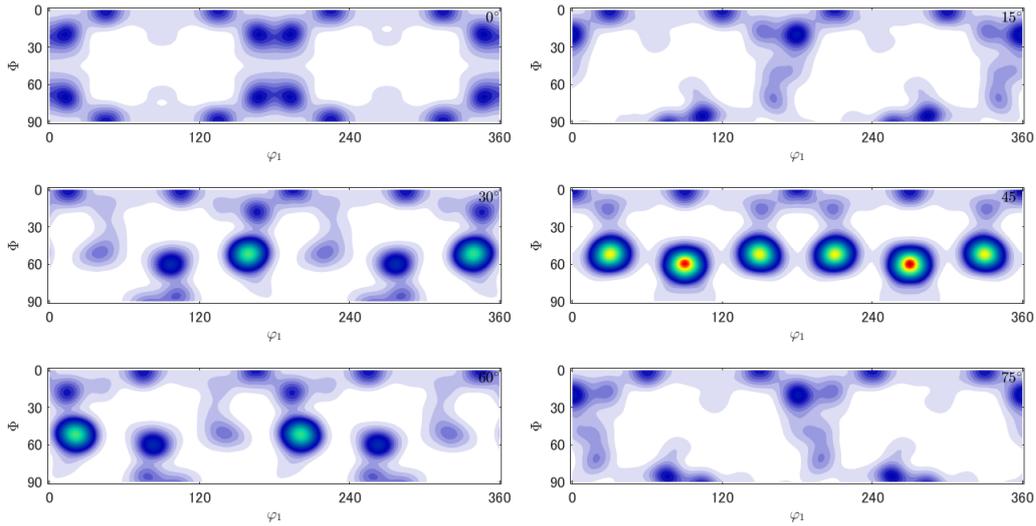
{1241}<014>

(124-1)[014]	(76.7,85.48,71.56)	5.005639553070068
(12-14)[0-4-1]	(14.81,71.62,85.96)	5.2306294441223145
(4112)[1-40]	(0.0,18.96,75.96)	5.188474655151367
(1412)[4-10]	(0.0,18.96,14.04)	5.188475131988525

MAX {1241}<014> 5.231 (14.81 71.62 85.96)

最大方位密度が制限付き<011>//ND内 18.847
{1241}<014> 5.231>3

MTEXでは



J:\2022-07-16-P3951402\TXT2\MTEX\NTEXODF.txt

<011>//TDspecial

(90.0,0.0,45.0)---(90.0,90.0,45.0)V1

MAXODF:19.794 (90.0 60.0 45.0)

ε-Fiber

85.0	60.0	40.0	11.6117575
85.0	60.0	45.0	16.59755
90.0	60.0	40.0	16.1532375
90.0	60.0	45.0	19.79389

Maxefiber:19.794 (90.0 60.0 45.0)

{1241}<014>

(124-1)[014]	(76.7,85.48,71.56)	3.9330249999999998
(12-14)[0-4-1]	(14.81,71.62,85.96)	4.01209
(4112)[1-40]	(0.0,18.96,75.96)	3.9879274999999996
(1412)[4-10]	(0.0,18.96,14.04)	3.9879275
MAX {1241}<014>	4.012 (14.81 71.62 85.96)	

最大方位密度が制限付き<011>//ND内 19.794
{1241}<014> 4.012>3

まとめ

シュミレーションでは、LaboTexでModellingを行い、極点図をExportし
反射極点図 {110}、{200}、{211} を作成し
各種ODFで解析を行った結果以下の値が得られた。

	最大ODF密度	制限付き ϵ Fiber最大密度	{1241}K014>最大密度
LaboTex	22.388	22.388	6.631
TexTools	15.739	15.739	4.496
StandardODF	18.847	18.847	5.231
MTEX	19.794	19.794	4.012

この値はシュミレーション結果であり、測定データではありません。

測定データの場合、主方位以外に多数の方位やrandomも存在する事もあり、
シュミレーション結果とは異なります。測定データの信頼性評価が重要になります。