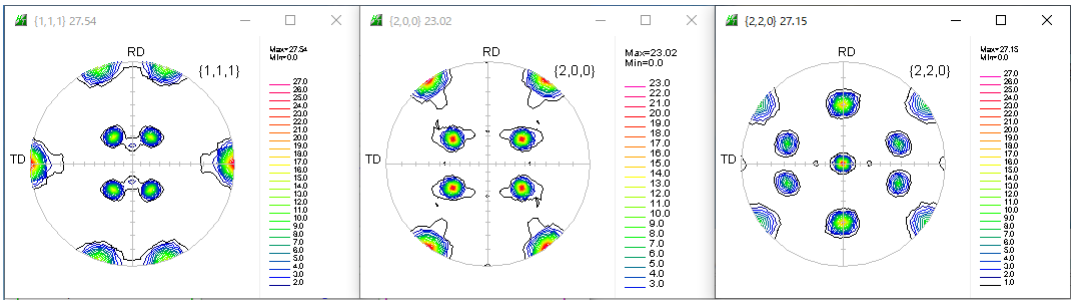
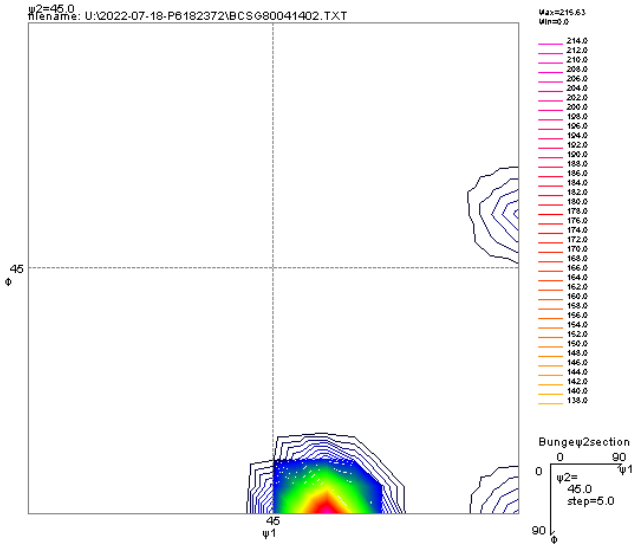
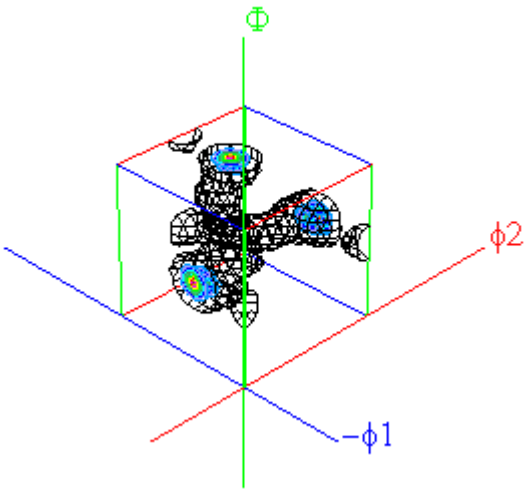
ＧＰＯＤＧＦＤｉｓｐｌａｙの応用

特許公報　二次電池集電体用銅合金圧延箔および製造方法

Ｐ６１８２３７２をシュミレーション







２０２２年０７月１９日

ＨｅｌｐｅｒＴｅｘ　Ｏｆｆｉｃｅ

概要

特許請求範囲に結晶方位を扱った申請があります。以前はＸＲＤを用いていたが、
最近は，ＥＢＳＤ利用が目立っています。しかし、圧延版などの場合、材料の広い範囲データが必要になり、ＸＲＤが利用されています。
今回は、銅合金圧延箔に適用されている特許公報を扱ってみます。

ＸＲＤ結晶方位に関する請求範囲

Ｂｒａｓｓ方位｛１１０｝＜１１２＞、Ｃｏｐｐｅｒ方位｛１２１｝＜１１１＞
Ｓ方位｛２３１｝＜３４６＞、Ｇｏｓｓ方位｛１１０｝＜００１＞の結晶方位密度を
それぞれ、Ｂ，Ｃ，Ｓ，Ｇとしたとき、

０．１６　＝＜　Ｂ／Ｃ／（Ｇ＋Ｓ）＜＝０．６

解説

結晶方位を扱う場合、方位密度とＶｏｌｕｍｅＦｒａｃｔｉｏｎ（ＶＦ％）があります。
ＶＦ％はＸＲＤの場合、体積分率（体積率)、ＥＢＳＤの場合、面積率と表現されています。
結晶方位とＶＦ％の関係は、ｅｕｌｅｒ角度（φ1，Φ,φ２）の広がりを同一とし、
同じＶＦ％の場合

Ｂ：Ｃ：Ｇ：Ｓ＝２：２：１：４の関係があります。

全てＶＦ％＝２５％の場合

％表記による計算では２５／２５／（２５＋２５）＝０．０２

結晶方位で計算した場合

２／２／（４＋１）＝０．２

今回は、結晶方位でシュミレーションを行ってみます。

		比率	密度
Ｂｒａｓｓ	ＶＦ＝８０％	１	８０
Ｃｏｐｐｅｒ	ＶＦ＝４％	１	４
Ｓ	ＶＦ＝１４％	０．５	７
Ｇｏｓｓ	ＶＦ＝２％	２	４

Ｂ／Ｃ／（Ｇ＋Ｓ）=８０／４／（７＋４）＝１．８

シュミレーション

対称性

Ｂｒａｓｓ｛１１０｝＜１１２＞

（１１０）［１－１２］　（５４．７４，９０．０，４５．０）

（０１１）［２－１１］　（３５．２６，４５．０，０．０）

（１０１）［－１－２１］（３５．２６，４５．０，９０．０）

Ｃｏｐｐｅｒ｛１２１｝＜１１１＞

（１２１）［１－１１］　（３９．２３，６５．９１，２６．５７）

（１１２）［－１－１１］（９０．０，３５．２６，４５．０）

Ｓ｛２３１｝＜３４６＞

（２３１）［３－４６］　（５２．８７，７４．５０，３３．６９）

（２１３）［－３－６４］（５８．９８，３６．７０，６３．４３）

（１３２）［６－４３］　（２７．０３，５７．６９，１８．４３）

Ｇｏｓｓ｛１１０｝＜００１＞

（１１０）［００１］　　（９０．０，９０．０，４５．０）

（０１１）［１００］　　（０．０，４５．０，０．０）

（１０１）［０－１０］　（０．０，４５．０，９０．０）

測定される結晶方位の値は測定Ｓｔｅｐに影響受ける方位があります。

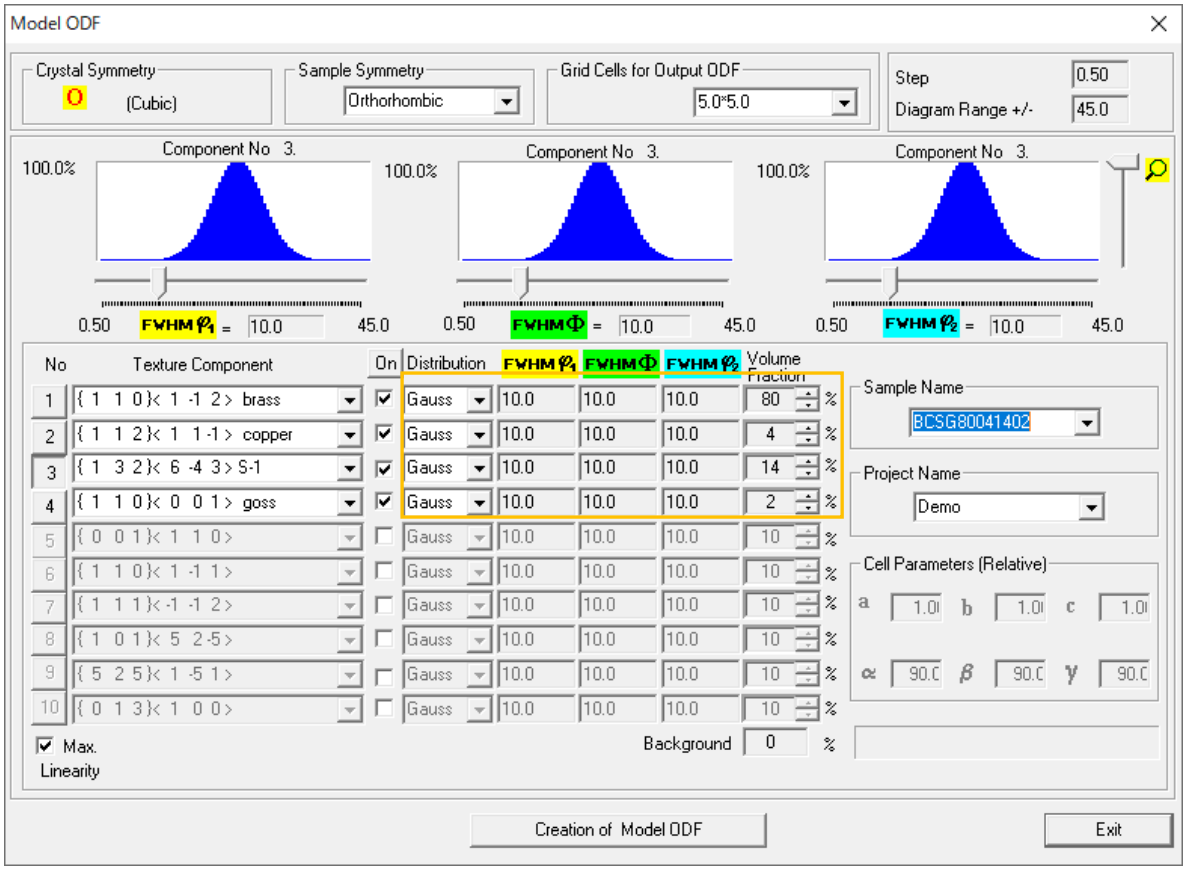
Ｓｔｅｐ＝５．０で方位のシフトがない場合

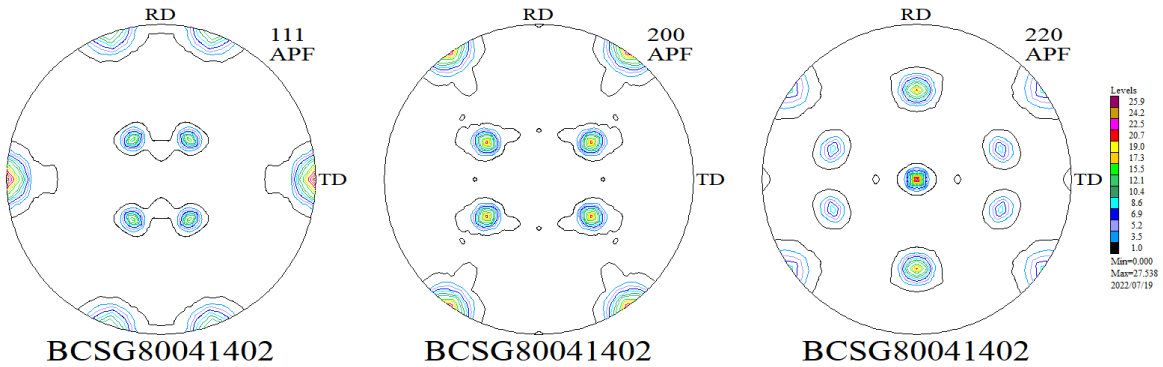
Ｇｏｓｓは全て同一の値が測定されるが、他の方位は等価方位により格子点から外れる為、

異なった値で、正しい値より少ない値を示します。

本資料では、結晶方位の値は等価方位の最大値を採用します（正しい値に近づける)。

Ｂｒａｓｓ＝８０％，Ｃｏｐｐｅｒ＝４％、Ｓ＝１４％、Ｇｏｓｓ＝２％でＦＷＨＭを１０



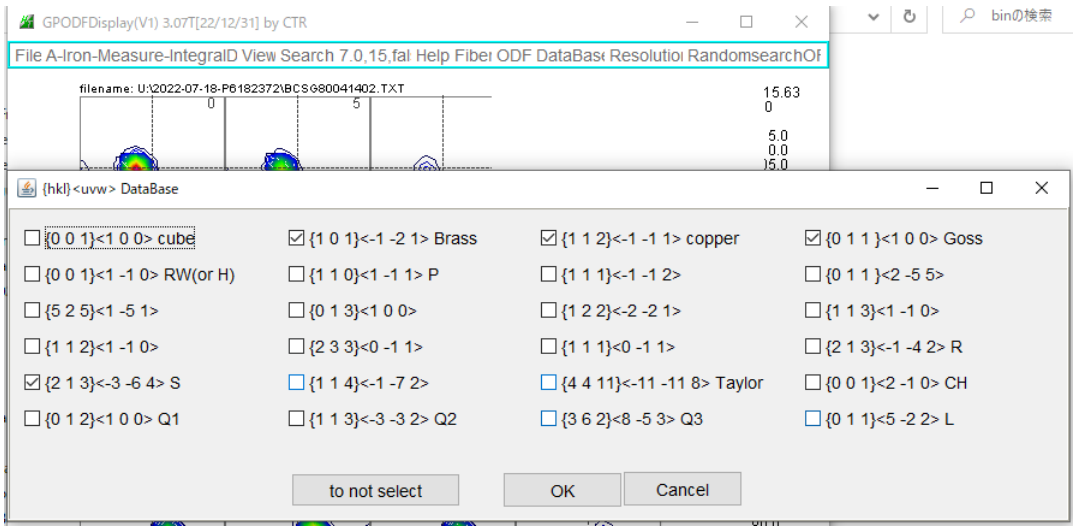


極点図の測定では測定間隔５度が一般的であるが、間隔を狭くすれば、正しい強度測定が可能になるが測定時間が長くなり、ＯＤＦ図表示もスピードが遅くなります。

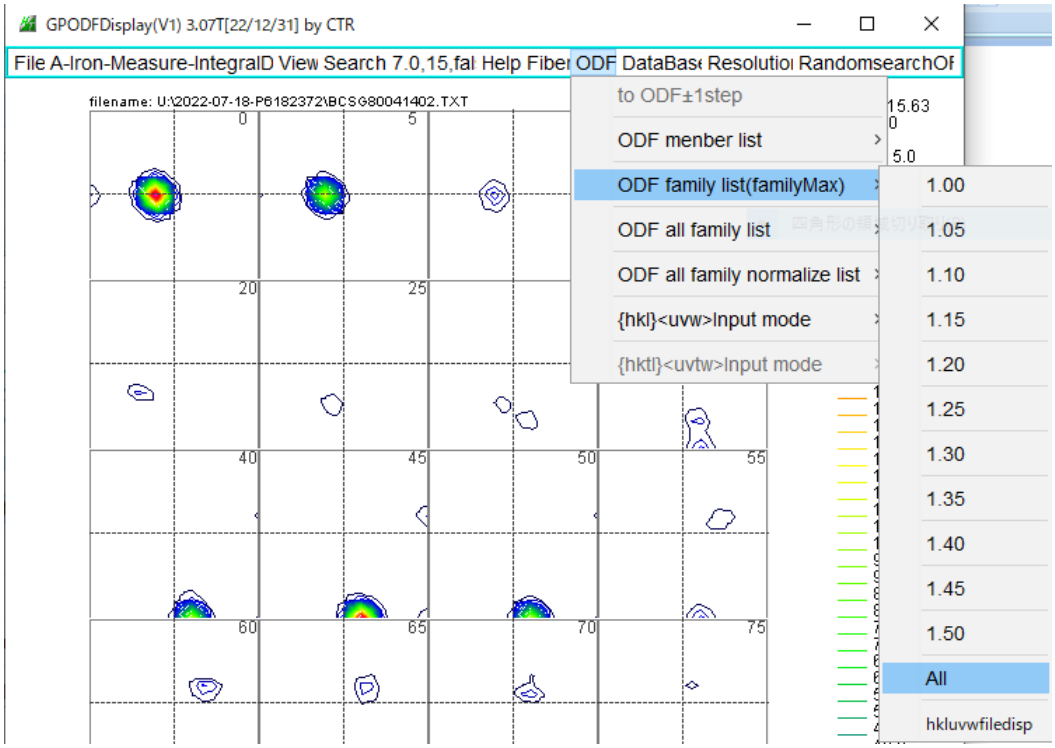
以降、この極点図から反射極点図を作成し、各種ＯＤＦで解析を行い、Ｂ／Ｃ／（Ｓ＋Ｇ）を計算

Ｂ／Ｃ／（Ｓ＋Ｇ）の計算をＧＰＯＤＦＤｉｓｐｌａｙソフトウエアで実施

従来は、調べる方位を指定して



各方位の最大値を計算



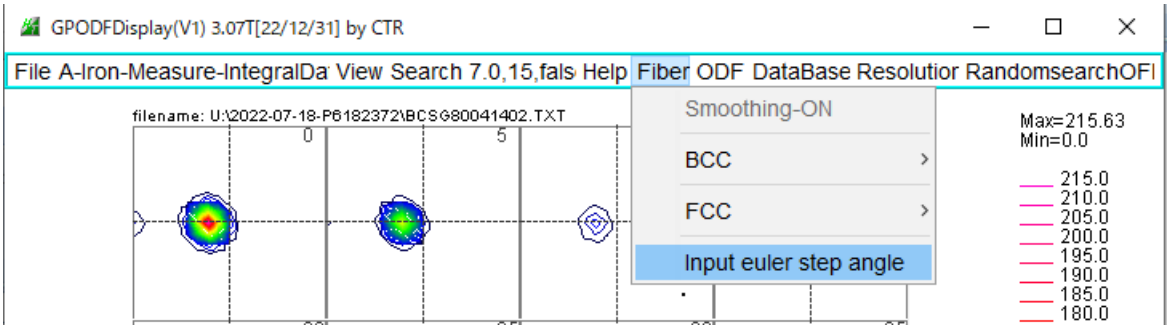
TextDisplay 1.14S C:¥CTR¥work¥ODFDisplay¥ODF.txt

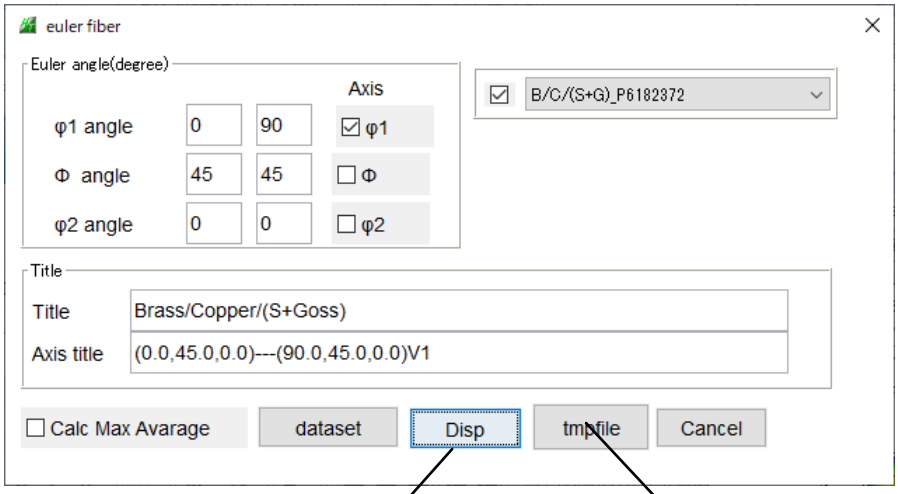
File Help

MaxOrientation	φ1	Φ	φ2	ODF
{1 0 1}<-1 -2 1> Brass	35.26	45.0	90.0	215.63
{1 3 2}<6 -4 3> S	27.03	57.69	18.43	11.42
{1 1 2}<-1 -1 1> copper	90.0	35.26	45.0	10.85
{0 1 1}<1 0 0> Goss	0.0	45.0	0.0	10.8
MAXODF=215.63	MINIODF=0.0 (Weight=0 Cycle=10)			

hkluvwfiledisp は最後のページに ODF ソフトウエアで解析した結果を掲載しています。

ＧＰＯＤＦＤｉｓｐｌａｙによる専用の計算

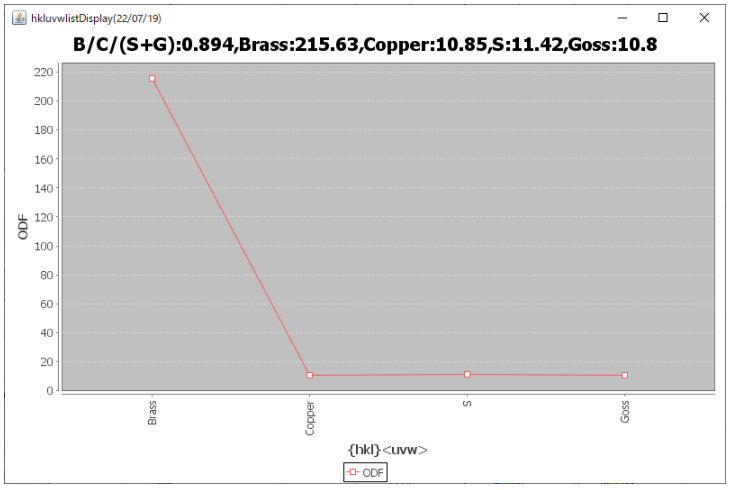




U:\2022-07-18-P6182372\BCSG80041402.TXT

Brass/Copper/(S+Goss)

Brass
(110)[1-12] (54.74,90.0,45.0) 215.633
(011)[2-11] (35.26,45.0,0.0) 215.629
(101)[-1-21] (35.26,45.0,90.0) 215.629
Brass max=215.633



Copper
(121)[1-11] (39.23,65.91,26.57) 9.89
(121)[1-11] (90.0,35.26,45.0) 10.849
Copper max=10.8494

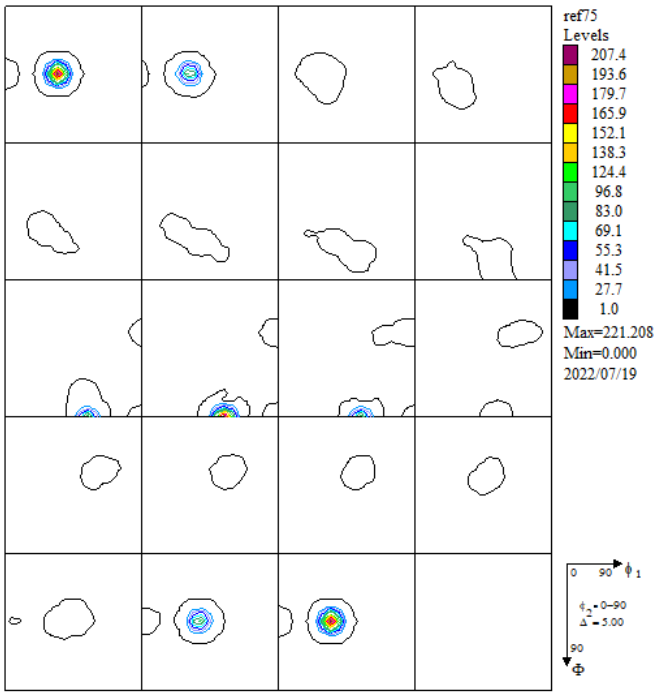
S
(231)[3-46] (52.87,74.5,33.69) 11.423
(213)[-3-64] (58.98,36.7,63.43) 11.358
(132)[6-43] (27.03,57.69,18.43) 11.313
S max=11.4232

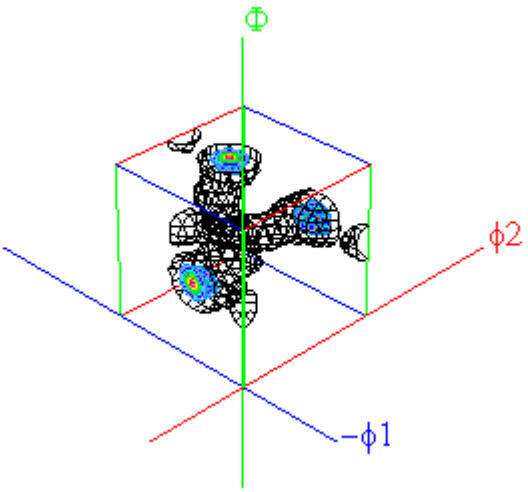
Goss
(110)[001] (90.0,90.0,45.0) 10.8
(011)[100] (0.0,45.0,0.0) 10.8
(011)[100] (0.0,45.0,90.0) 10.8
Goss max=10.8

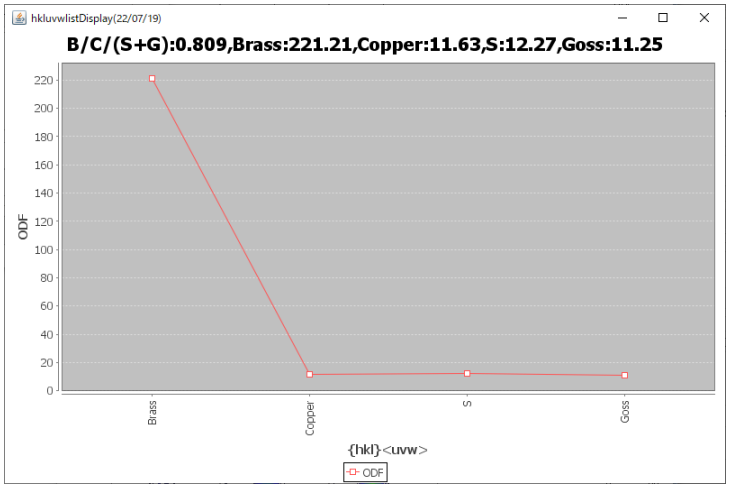
Brass/Copper/(S+Goss) : 0.894

以降、反射極点図から各種 ODF で解析を行い、B/C/（S+G）を比較してみます。

ＬａｂｏＴｅｘで解析







U:\2022-07-18-P6182372\TXT2\LaboTex\CCW\ref75.TXT

Brass/Copper/(S+Goss)

Brass

(110)[1-12]	(54.74,90.0,45.0)	212.072
(011)[2-11]	(35.26,45.0,0.0)	221.208
(101)[-1-21]	(35.26,45.0,90.0)	221.208

Brass max=221.208

Copper

(121)[1-11]	(39.23,65.91,26.57)	9.27
(121)[1-11]	(90.0,35.26,45.0)	11.63

Copper max=11.6297

S

(231)[3-46]	(52.87,74.5,33.69)	11.763
(213)[-3-64]	(58.98,36.7,63.43)	10.914
(132)[6-43]	(27.03,57.69,18.43)	12.266

S max=12.2657

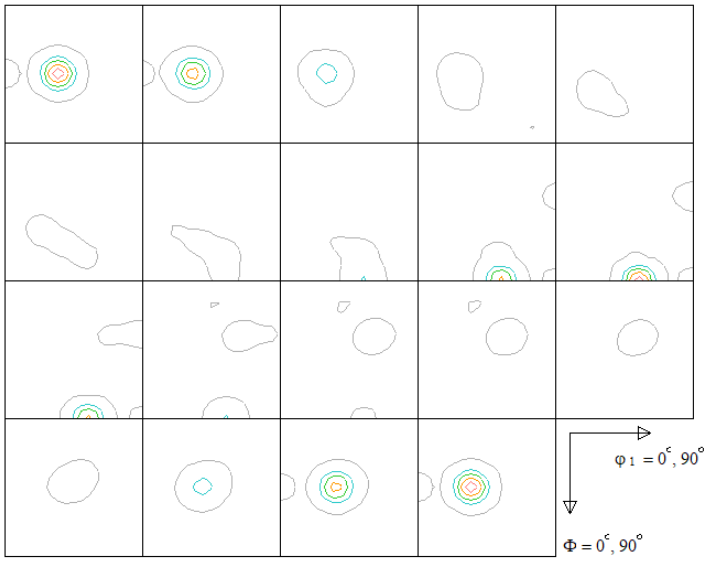
Goss

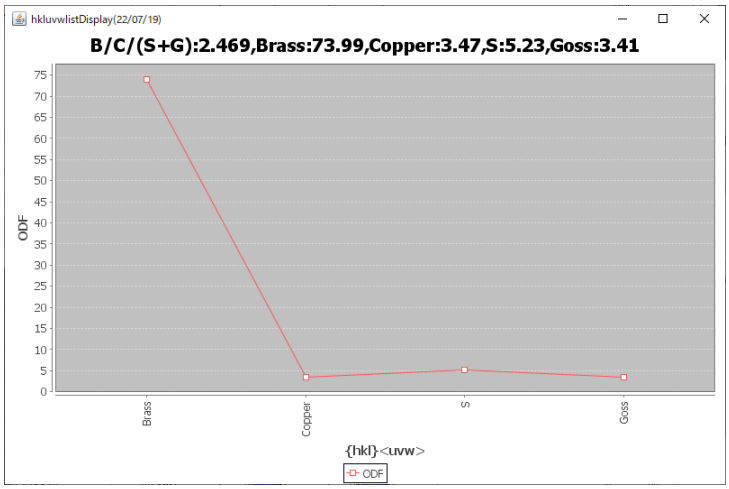
(110)[001]	(90.0,90.0,45.0)	10.74
(011)[100]	(0.0,45.0,0.0)	11.252
(011)[100]	(0.0,45.0,90.0)	11.252

Goss max=11.2524

Brass/Copper/(S+Goss) : 0.809

ＴｘＴｏｏｌｓで解析





J:\2022-07-18-P6182372\TXT2\TexTools\Cu.HODF

Brass/Copper/(S+Goss)

Brass

(110)[1-12]	(54.74,90.0,45.0)	70.141
(011)[2-11]	(35.26,45.0,0.0)	73.988
(101)[-1-21]	(35.26,45.0,90.0)	73.988

Brass max=73.9876

Copper

(121)[1-11]	(39.23,65.91,26.57)	2.843
(121)[1-11]	(90.0,35.26,45.0)	3.469

Copper max=3.4685

S

(231)[3-46]	(52.87,74.5,33.69)	4.999
(213)[-3-64]	(58.98,36.7,63.43)	5.232
(132)[6-43]	(27.03,57.69,18.43)	4.606

S max=5.2322

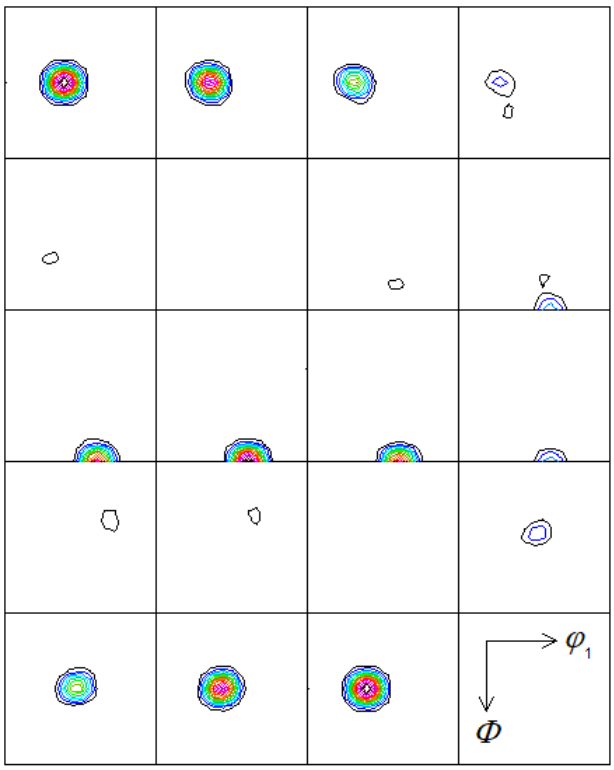
Goss

(110)[001]	(90.0,90.0,45.0)	3.356
(011)[100]	(0.0,45.0,0.0)	3.407
(011)[100]	(0.0,45.0,90.0)	3.407

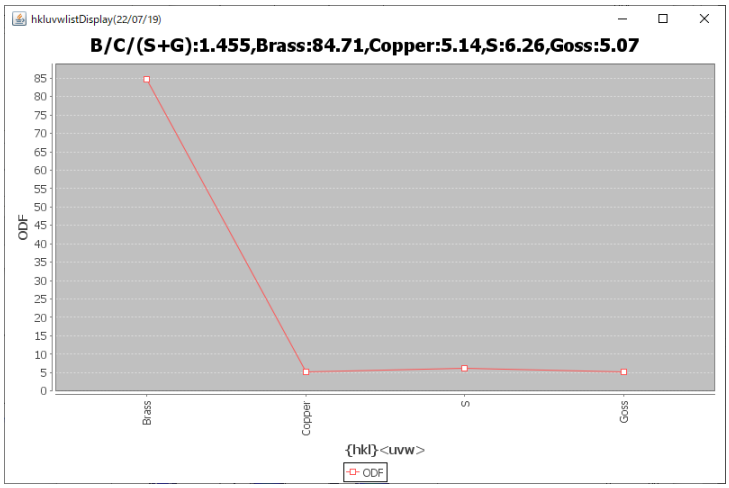
Goss max=3.4073

Brass/Copper/(S+Goss) : 2.469

Ｓｔａｎｄａｒｄ ＯＤＦで解析



Contour Levels: 5.0 10.0 15.0 20.0 25.0 30.0 35.0 40.0 45.0 50.0 55.0 60.0 65.0 70.0 75.0



U:\2022-07-18-P6182372\TXT2\StandardODF\ODF15

Brass/Copper/(S+Goss)

Brass

(110)[1-12]	(54.74,90.0,45.0)	84.712
(011)[2-11]	(35.26,45.0,0.0)	84.712
(101)[-1-21]	(35.26,45.0,90.0)	84.712

Brass max=84.71244812011719

Copper

(121)[1-11]	(39.23,65.91,26.57)	4.905
(121)[1-11]	(90.0,35.26,45.0)	5.143

Copper max=5.1426825523376465

S

(231)[3-46]	(52.87,74.5,33.69)	3.841
(213)[-3-64]	(58.98,36.7,63.43)	5.776
(132)[6-43]	(27.03,57.69,18.43)	6.256

S max=6.2559356689453125

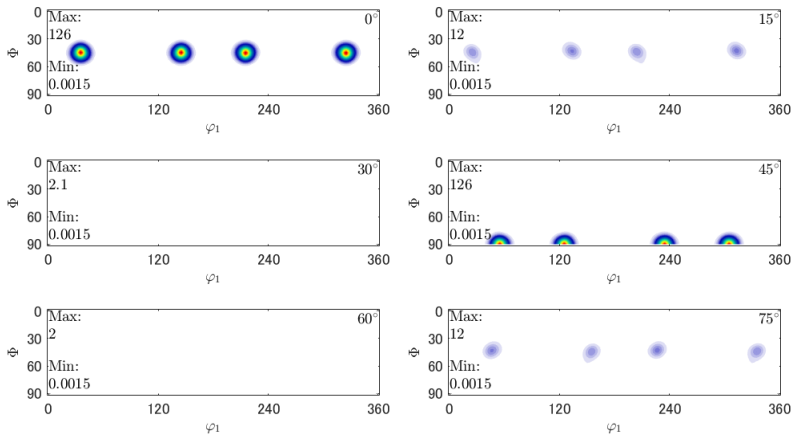
Goss

(110)[001]	(90.0,90.0,45.0)	5.066
(011)[100]	(0.0,45.0,0.0)	5.066
(011)[100]	(0.0,45.0,90.0)	5.066

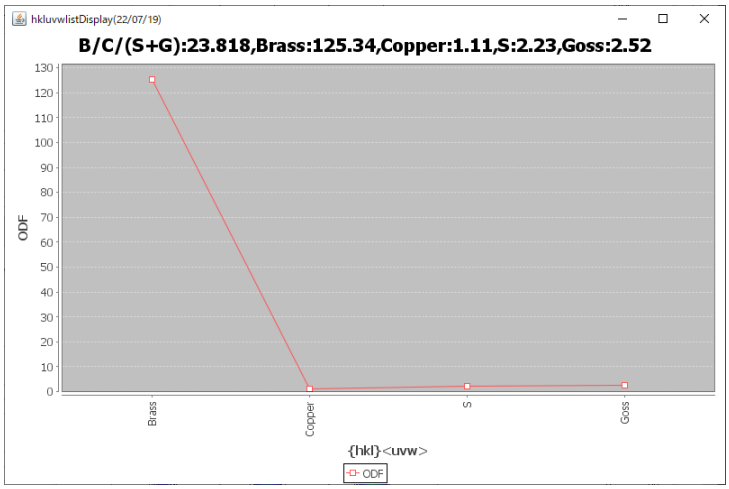
Goss max=5.06590461730957

Brass/Copper/(S+Goss) : 1.455

ＭＴＥＸで解析（FWHMはｄｅｆａｕｌｔ）




```
Radially symmetric portion:
  kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°
  center: 4901 orientations, resolution: 5°
  weight: 1
```



U:\2022-07-18-P6182372\TXT2\MTEX\MTEXODF.txt

Brass/Copper/(S+Goss)

Brass

(110)[1-12]	(54.74,90.0,45.0)	125.335
(011)[2-11]	(35.26,45.0,0.0)	125.335
(101)[-1-21]	(35.26,45.0,90.0)	125.335

Brass max=125.33512

Copper

(121)[1-11]	(39.23,65.91,26.57)	1.106
(121)[1-11]	(90.0,35.26,45.0)	1.108

Copper max=1.10781

S

(231)[3-46]	(52.87,74.5,33.69)	1.829
(213)[-3-64]	(58.98,36.7,63.43)	2.23
(132)[6-43]	(27.03,57.69,18.43)	1.531

S max=2.230435

Goss

(110)[001]	(90.0,90.0,45.0)	2.52
(011)[100]	(0.0,45.0,0.0)	2.52
(011)[100]	(0.0,45.0,90.0)	2.52

Goss max=2.51974

Brass/Copper/(S+Goss) : 23.818

まとめ

数値を集計すると

	Brass	Copper	S	Goss	B/C/(S+G)	B/C	B/(F+G)
LaboTex	221.2080	11.6297	12.2657	11.2524	0.809	19.021	9.406
TexTools	73.9876	3.4685	5.2322	3.4073	2.469	21.331	8.564
StandardODF	84.7124	5.1427	6.2559	5.0660	1.455	16.472	7.482
MTEX	125.3350	1.1078	2.2330	2.5197	23.818	113.139	26.371

Ｃｏｐｐｅｒの値がばらつき、計算結果に反映しています。

Ｂｒａｓｓに比べ、他の成分量が少ないため、正確な値が求められていない。

解析ＯＤＦソフトウエアを固定した評価が必要