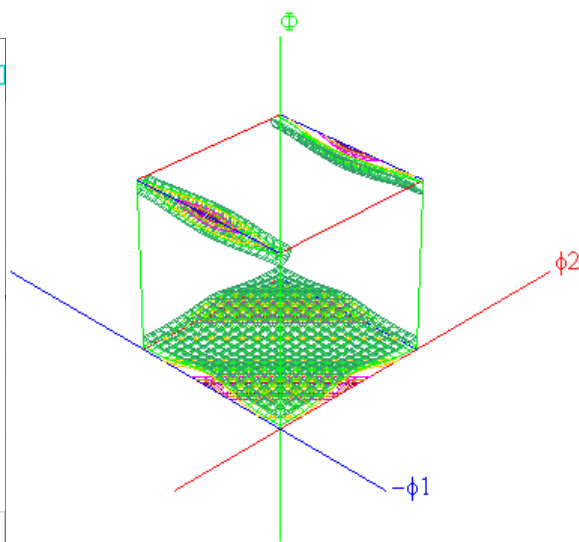
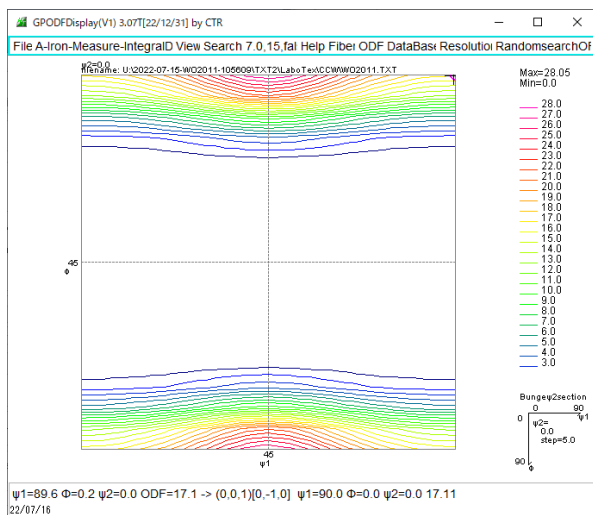
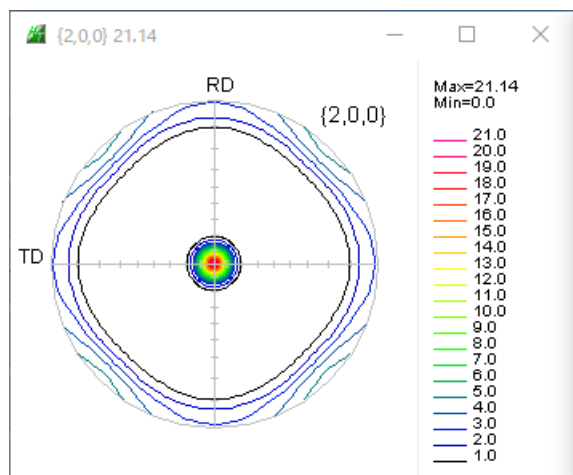


GPODFDisplayの応用

公開特許公報 WO2011-105609をシュミレーション

結晶軸 $\langle 001 \rangle$ の方位が制御された体心立方（BCC）構造の固溶体である金属材料および製造方法



2022年07月16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

方位分布関数  $\phi$  断面 = 0, 断面  $\Phi = 0$  線上の方位分布関数が 1.4 以上

## 解説

方位分布関数  $\phi$  2 断面 = 0, 断面  $\Phi = 0$  線上の方位分布関数が 1.4 以上

$\langle 001 \rangle // ND$  ( $\phi 2 = 0, \Phi = 0, \phi 1 \rightarrow 90$ )  $\theta$ -Fiber 上の  
結晶方位分布関数値が 1.4 以上

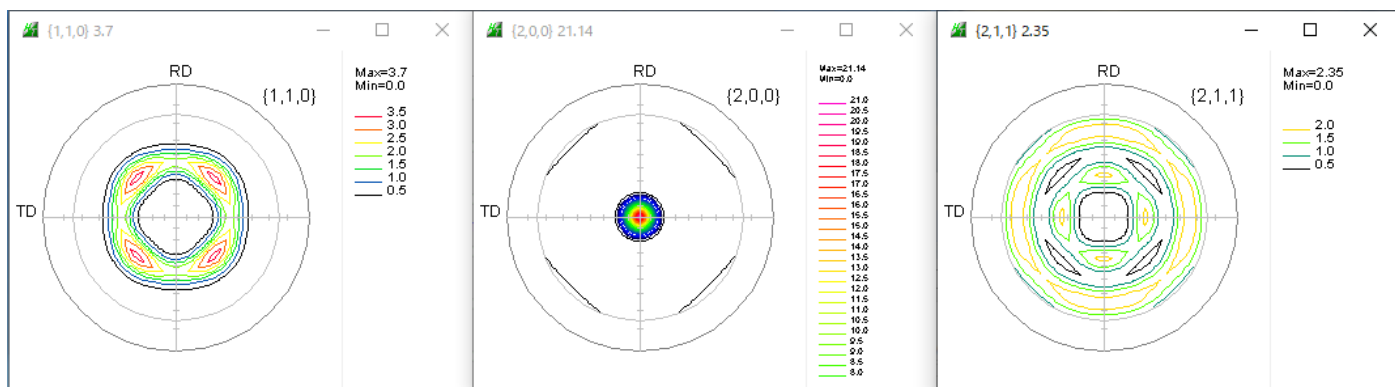
$\langle 001 \rangle // ND$  の最小値を評価する

## シミュレーション

$\langle 001 \rangle$ -Fiber FWHM $\Phi = 1.5$ , FWHM $\phi 2 = 1.5$  VF 60%

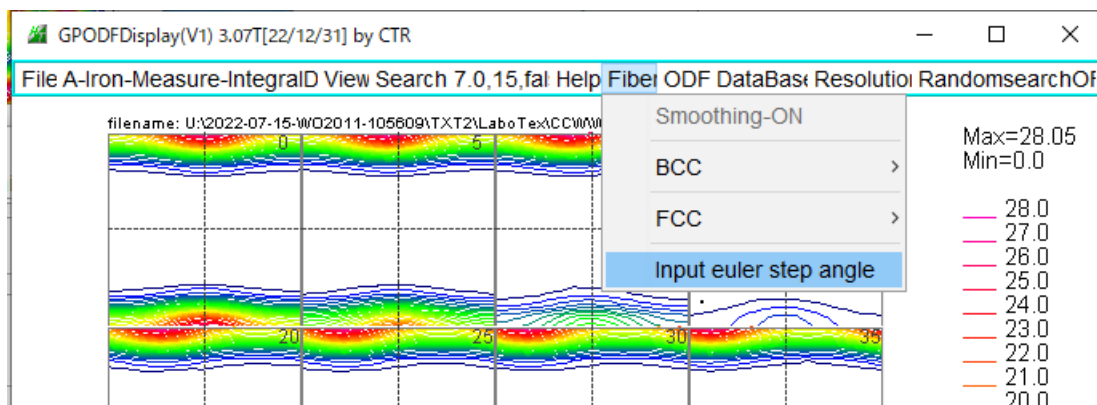
$\{001\} \langle 110 \rangle$  FWHM $\phi 1 = 4.5$ , FWHM $\Phi = 2.0$ , FWHM $\phi 2 = 2.0$  VF 40%

から反射極点図を作成



各種 ODF で解析を行い、ODF 図を E x p o r t し比較する

計算はGPODFDisplayソフトウェアのFiber解析で行う



euler fiber

Euler angle(degree)

Axis

<001>//ND  $\theta$  -Fiber\_WO2011-105609

$\phi$ 1 angle 0.0 90.0   $\phi$ 1  
 $\Phi$  angle 0.0 0.0   $\Phi$   
 $\phi$ 2 angle 0.0 0.0   $\phi$ 2

Title

Title <001>//ND  
 Axis title (0.0,0.0,0.0)--(90.0,0.0,0.0)V1

Calc Max Average dataset Disp tmpfile Cancel

TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\GPODFDisplay\tmpfile.txt

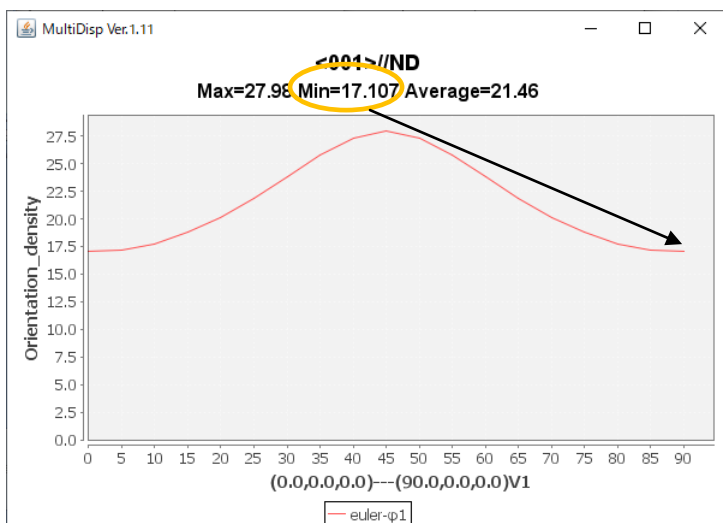
File Help

U:\2022-07-15-WO2011-105609\TXT2\LaboTex\CCW\WO2011.TXT

Angle (degree)	Orientation Density
0.0	17.1151
5.0	17.227
10.0	17.7858
15.0	18.8176
20.0	20.1048
25.0	21.8284
30.0	23.8451
35.0	25.8263
40.0	27.3319
45.0	27.9796
50.0	27.3319
55.0	25.8263
60.0	23.8451
65.0	21.8284
70.0	20.1048
75.0	18.8176
80.0	17.7858
85.0	17.227
90.0	17.1065

max=27.9796 min=17.1065 average=21.4597

Max=27.98 Min=17.107 Average=21.46

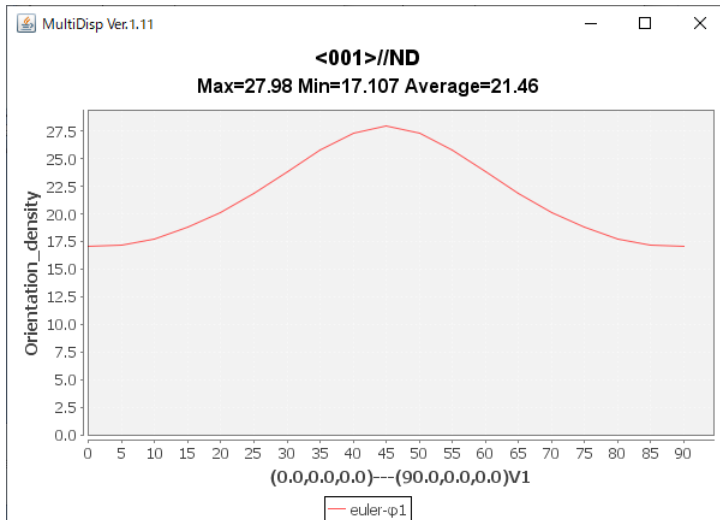
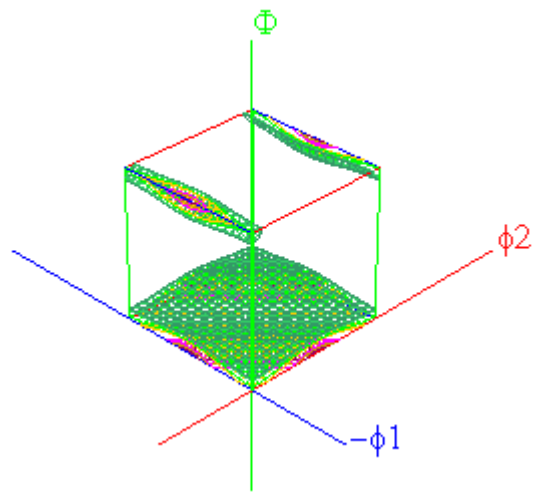
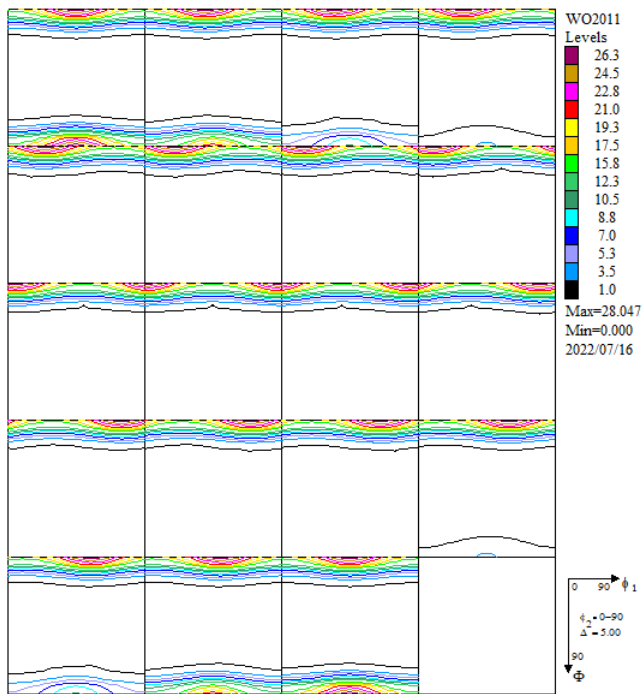


$\theta$  - Fiber が 14 以上

$\theta$  - Fiber 上の値が全て 14 以上

$\theta$  - Fiber の最小値の評価

LaboTexで解析



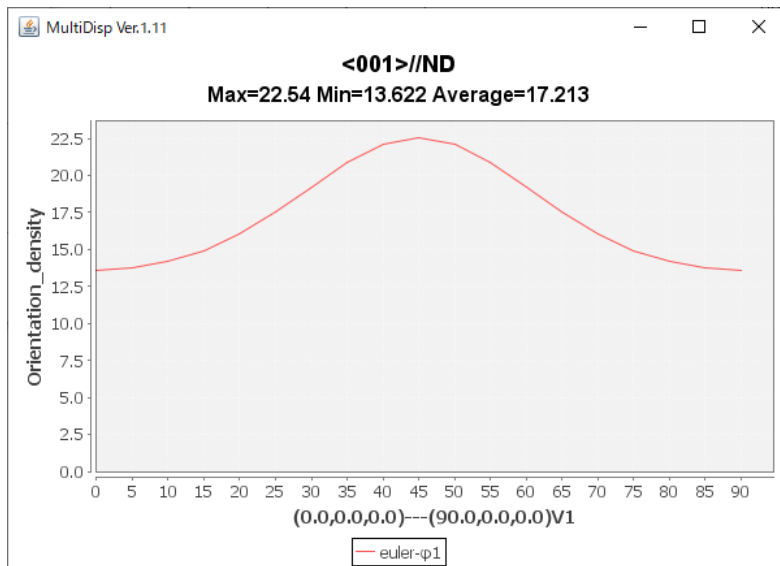
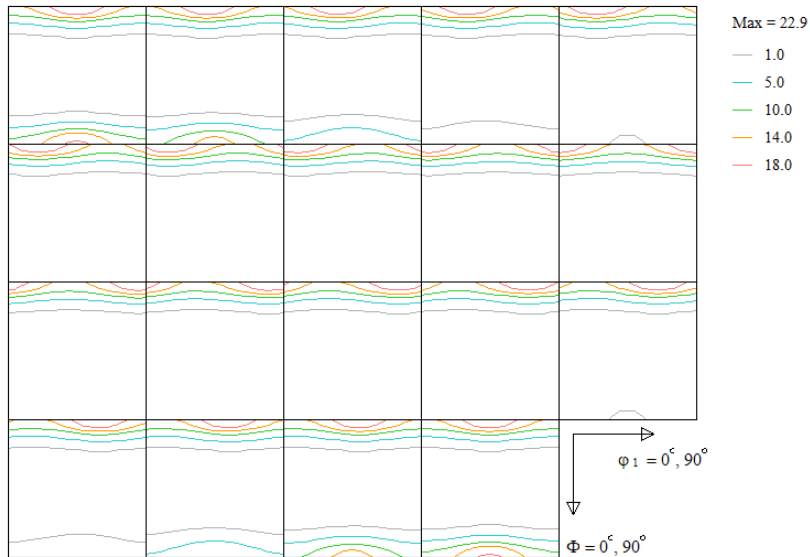
<001>//ND の最小値は 17.107 >14

J:\2022-07-15-WO2011-105609\TXT2\LaboTex\CCW\WO2011.TXT

<001>//ND	
0.0	17.1151
5.0	17.227
10.0	17.7858
15.0	18.8176
20.0	20.1048
25.0	21.8284
30.0	23.8451
35.0	25.8263
40.0	27.3319
45.0	27.9796
50.0	27.3319
55.0	25.8263
60.0	23.8451
65.0	21.8284
70.0	20.1048
75.0	18.8176
80.0	17.7858
85.0	17.227
90.0	17.1065
max=27.9796 min=17.1065 average=21.4597	

Max=27.98 Min=17.107 Average=21.46

TexToolsで解析



J:\2022-07-15-WO2011-105609\TXT2\TexTools\TexTools.HODF

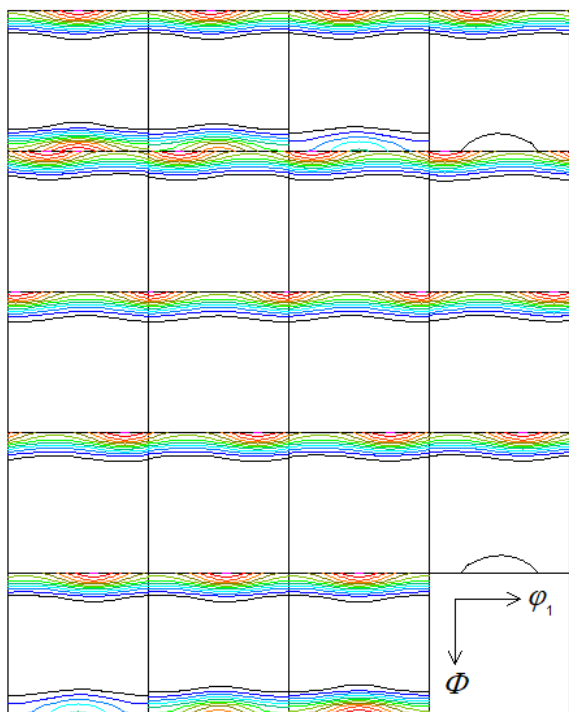
```

<001>//ND
0.0      13.6215
5.0      13.746
10.0     14.1676
15.0     14.9465
20.0     16.0783
25.0     17.5465
30.0     19.2195
35.0     20.8452
40.0     22.0788
45.0     22.5395
50.0     22.0788
55.0     20.8452
60.0     19.2195
65.0     17.5465
70.0     16.0783
75.0     14.9465
80.0     14.1676
85.0     13.746
90.0     13.6215
max=22.5395 min=13.6215 average=17.2126
    
```

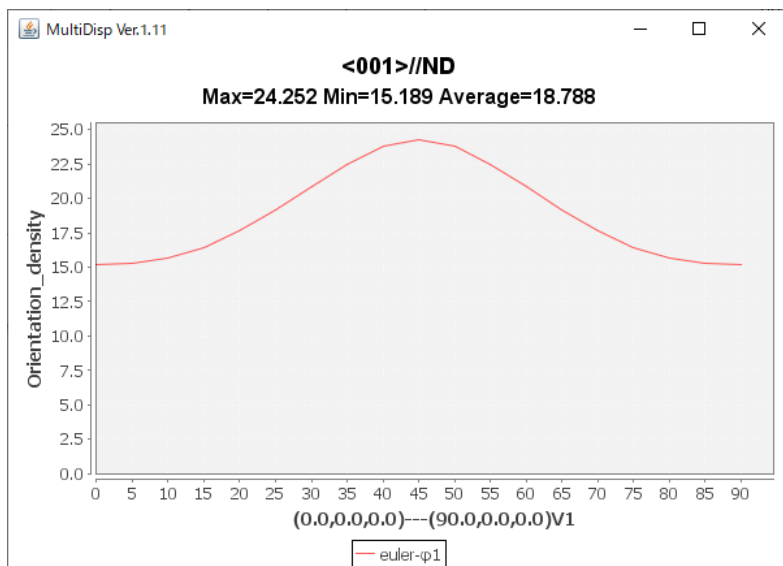
Max=22.54 Min=13.622 Average=17.213

<001>//ND の最小値は 13.622 <14

Standard ODFでは



Contour Levels: 2.0 4.0 6.0 8.0 10.0 12.0 14.0 16.0 18.0 20.0 22.0 24.0



J:\2022-07-15-WO2011-105609\TXT2\StandardODF\ODF15

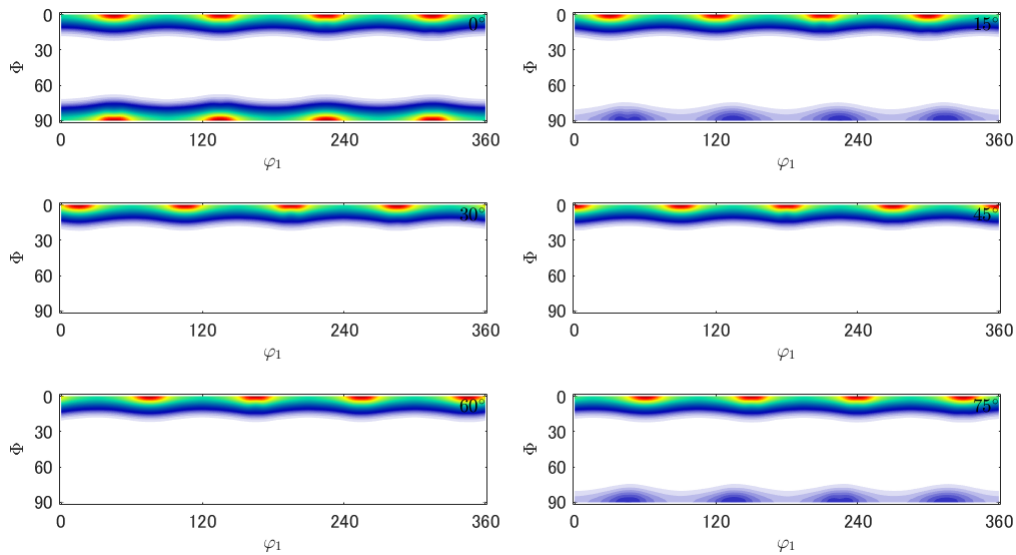
```

<001>//ND
0.0      15.189398765563965
5.0      15.288162231445312
10.0     15.65262508392334
15.0     16.412446975708008
20.0     17.609302520751953
25.0     19.13932991027832
30.0     20.83173370361328
35.0     22.481273651123047
40.0     23.75864028930664
45.0     24.251575469970703
50.0     23.758638381958008
55.0     22.48127555847168
60.0     20.83173370361328
65.0     19.13932991027832
70.0     17.609302520751953
75.0     16.412446975708008
80.0     15.65262508392334
85.0     15.288162231445312
90.0     15.189398765563965
max=24.251575469970703 min=15.189398765563965 average=18.7883
    
```

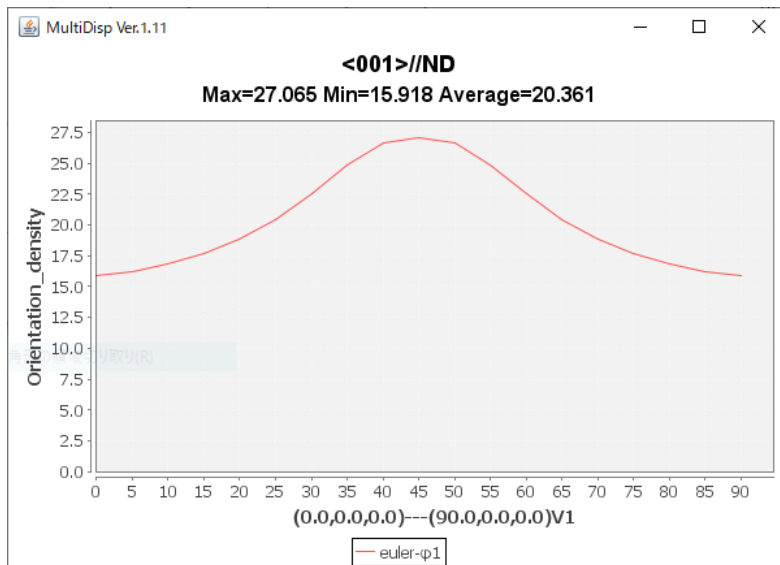
Max=24.252 Min=15.189 Average=18.788

<111>//ND の最小値は 15.189 >14

MTEXでは



GPODFDisplayでTriclinic→Orthorhombic  
MTEX内、Orthorhombicで計算の場合、 $\phi_1=90$ データ欠落



J:\2022-07-15-WO2011-105609\TXT2\MTEX\MTEXODF.txt

```

<001>//ND
0.0      15.91834
5.0      16.216995
10.0     16.867510000000003
15.0     17.65596
20.0     18.799495
25.0     20.456834999999998
30.0     22.51838
35.0     24.836485
40.0     26.62355
45.0     27.06458
50.0     26.62355
55.0     24.836484999999996
60.0     22.51838
65.0     20.456834999999998
70.0     18.799495
75.0     17.65596
80.0     16.867510000000003
85.0     16.216995
90.0     15.91834
max=27.06458      min=15.91834      average=20.3606
Max=27.065 Min=15.918 Average=20.361
    
```

<111>//ND の最小値は 15.918 >14

## まとめ

シュミレーションは、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。

	$\langle 001 \rangle // ND$ 最小値
LaboTex	17.107
TexTools	13.622
StandardODF	15.189
MTEX	15.918

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。Rp%などの測定データの信頼性評価が重要になります。