



材料面 {hk1}、RD 方向<UVW>

産業界における結晶方位の利用例

アルミニウム合金箔及びその製造方法、成形包装体 材料、二次電池、医薬品包装容器

WO 2013168606 A1

要約書

良好な成形性を有するアルミニウム合金箔を提供する。 Fe:0.8~2.0mas s%、Si:0.05~0.2mass%、Cu:0.0025~0.2mass%を含有し、残部がAI 及び不可避的不純物からなるアルミニウム合金箔であり、上記アルミニウム合金箔 は、アルミニウム合金箔表面の結晶方位における、Cube方位密度が5以上で、R方 位密度が50以下であり、上記アルミニウム合金箔の平均結晶粒径は7~20µmであ る、アルミニウム合金箔を提供する。

| 公告番号 公開タイプ 出願番号 公開日 出願日 優先日 ⑦ | WO2013168606 A1 出願 PCT/JP2013/062396 2013年11月14日 2013年4月26日 2012年5月11日 |
|--|---|
| 次の番号でも公開 | CN104364401A |
| 発明者 | Masakazu Seki, 雅和 石, Satoshi Suzuki, 鈴木 覚 |
| 特許出願人 | Furukawa-Sky Aluminum Corp., 古河スカイ株 式会社 |
| 引用のエクスボート | BiBTeX, EndNote, RefMan |
| 引用特許 (3), 引用非特許 (1 |),分類 (16),法的なイベント (5) |

本実施形態において、アルミニウム合金箔は、最終焼鈍後に箔表面のCube方位密度が5以上で、R方位密度が50以下である。より好ましくは、最終焼鈍後に箔表面のCube方位密度が7以上で、R方位密度が30以下である。 なお、Cube方位密度及びR方位密度の数値は全てランダム結晶方位密度に対する倍数を表す。

Cube方位は {001}<100>を代表方位とし、R方位は {123} < 634>を代表方位とした。アルミニウム合金箔表面の結晶方 位密度の測定には、 {100}、 {110}、 {111}の不完全極点図を測定し、これらを元に三次元結晶方位解析 (ODF)を行なって調 べた。またこれらの解析においては、アルミニウム粉末から作られたランダム結晶方位を有する試料を測定して得たデータを {100}、 {110}、 {111}極点図の解析の際に使う規格化ファイルとし、これによりランダム方位を有する試料に対する倍数として 各種方位密度を求めた。なお本発明において、結晶方位密度は全て三次元結晶方位解析 (ODF)に基づくものである。

講習会の目的

材料特性に関係する集合組織の異方性を正確な定量値で評価する方法の習得 結晶方位の定量は方位分布図の Fitting でなければ計算出来ないことを習得

> SmartLab/Rigaku 極点解析/CTRソフトウエア ODF解析/LaboTex3. 1/LaboSoft

2015年11月26日 *HelperTex Office* 説明内容

極点測定

極点処理

r a n d o m 試料から補正用 Defocus ファイルを作成 配向のある試料の極点処理方法 最適化 R p %

$$RP_{\{hkl\}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left| \frac{\{PF_{\exp}\}_{i} - \{PF_{calc}\}_{i}}{\{PF_{\exp}\}_{i}} \right| \cdot 100\%$$

where :

 $RP_{\{hkl\}}$ - relative error for $\{hkl\}$ pole figure,

 $\{PF_{exp.}\}_{i}$ - intensity of experimental (corrected and normalized) pole figure in point i,

 $\{PF_{calc}\}_{i}$ - intensity of calculated pole figure in point i,

N - number of measured points on pole figure.

$$RP = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} RP_{\{hkl\}}$$

各種ODF向けファイルの作成

ODF解析

CTRODFにより、ODF図、逆極点図、極点図を作成し{hkl}<uvw>の決定 LaboTex2.1-DEMOによる LaboTex の操作法 LaboTex3.1 による VolumeFraction の決定









測定2 θ 角度とバックグランド位置の確認

| カスタマイズ - 透過・反射極点測定 |
|---|
| 試料情報 手動交換スリット条件 試料厚 (mm) 3.0 試料幅 (mm) 30.0 Soller / PSC (deg) Coller / (deg) T 現状維持 線吸収係数 (1/cm) 0.000 0000 0pen 5.0 見右位置読込 |
| 1.110 |
| |
| h k l (2期法 シュルツ ヱ] 測定hkl 1 1 0 ステップ C細かい C 普通 ● 粗い スピード C 遅い C 普通 ● 速い |
| 測定角度 (deg) 52.4000 F 子備測定実行 |
| データ測定条件 |
| 測定角度 ステップ軸 範囲指定 開始 終了 ステップ IS IS長手 RS1 RS2 アッテネータ (deg) |
| 25/10法 524000 2 10.000 ▼ |
| スキャン軸 範囲指定 モード 開始 終了 ステップ スピード Y 揺動 (deg) (deg) (deg) (deg/min) |
| β 絶対 連続 ▼ 0.00 360.00 ▼ 600.00 なし ▼ |
| ▼ バックグラウンド測定条件 |
| BG1角度 ステップ軸 ステップ RS1 RS2 BG2角度 ステップ軸 ステップ RS1 RS2 (deg) |
| 透過法 49.4000 α 5.000 10.000 ▼ |
| スキャン軸 測定方法 範囲指定 モード 開始 終了、 ステップ 計数時間 |
| は は は は は は は は は は は は は は |
| 推奨測定条件 |
| 測定所要時間合計: 028:16 閉じる 閉じる |

試料を傾けるとプロファイルが広がる(Defocus)



2. 極点処理(ODFPoleFigure1.5,ODFPoleFigure2)



結晶方位分布図を作成し、方位分析を行う。

4. ODFPoleFigure1. 5ソフトウエア

| バックグランド | 平滑化 RD |
|--|--|
| M ODFPolefigure1.5 1.18T[16/03/31] by CTR | |
| File Linear ToolKit Help InitSet Rp% | |
| Files select | |
| Calcration Condition Previous Next | Change Smoothing Cycles 2 Veight 9 Disc |
| Backgroud delete mode Image: Constraint of the state of the | Disp 0.0 Interporation V Full |
| Absorption coefficien 133.0 1/cm Thickness 0.2 | m 2Theta 0.0 deg. 💿 1/Kt Profile |
| Derocus The Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Image: Comparison of the Select Im | 1/Ra Profile Limit Alfa Defocus val Free |
| Standardize OutFiles Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image: Control of the standardize Image | aluOD - A Cancel Calc ODF File |
| | |
| 規格化 defocus Rp%の最適(| ↓ ↓ ↓ |

5. ODFPoleFigure2ソフトウエア

r a n d o m 試料なしで、 d e f o c u s 補正が可能。

| | バックグランド | 1 次元平滑化 | RD |
|---|---|--|--------------------|
| ODFPoleFigure2 3.43YT[16/03/31] by CTR | | | |
| File Linear(absolute) ToolKit Help InitSet BGMod | de Measure Condition Free OverlapRevision | MinimumMode Rp% | |
| Files select | | | |
| Calcration Condition | | hkl- | 0,0,0 Change |
| 🔽 🔘 DoubleMode 🔘 SingleMo 🔘 LowMode 🔘 Highl | Mode Nothing BG defocus DSH1.2mm+Schulz+RSH | H5mm - Minimum mo. | tic mean 👻 Disp |
| Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm ♥ PeakSlit / BGS | Slit BG Scope 80 deg. 90 deg. | Set Disp RD 0.0 Interpora | tion 🗸 🗸 Full Disp |
| AbsCalc | coefficien 133.0 1/cm Thickness 0.2 | Cm v 2Theta 0.0 deg. |) 1/Kt Profile |
| Defocus file Select | | ł | |
| Defocus(1) functions file C*CTR¥E Make defocus function files by TXT2 |)ATA¥O-Cube-Demo¥random-OdfPoleFigure¥defocus¥D Files ✓ Standardize |)EFOCUS_F.TXT | TextDisp |
| Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefoc | us) BB285mm-Slit-1mm-7mm 🗸 Lim | it Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) | • |
| Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) |) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm | Search minimum Rp%(Cubic only) | 1/Ra Profile |
| Smoothing for ADC | Standardize OutFiles | TXT2 Cancel Calc Calc | Exit&ODF ODF |
| | | | ValueODFVF-A |
| | | | |
| 2 次元平滑化 | 、 | efocus Rp%0 | D最適化 |
| | <u></u> | | |

吸収補正

6. Defocusデータの作り方

6. 1 無配向試料の極点測定データから多項式近似曲線を作成

極点処理はバックグランド削除

Random $\mathcal{F} - \mathcal{P}$ C:¥CTR¥DATA¥O-Cube-DEMO¥random-ODFPOleFigure

| ☑ ODFPoleFigure2 3.43YT[16/03/31] by CTR ☑ ☑ ☑ |
|---|
| File Linear(absolute) ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% |
| ASC(RINT-PC) |
| Calcration Condition Previous Next C#CTR#DATA#O-Cube-Demo#random-OdfPoleFigure#111ASC Backgroud delete mode @ @ @ DoubleMode @ SingleMo@ LowMode @ HighMode @ Nothing BG defocus DSH12mm+Schulz+RSH5mm * Minimum mo Peak slit 70 mm BG Slit 70 mm @ PeakSlit / BGSlit BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp RD D Interporation * @ Full Disp CAbsCalc |
| Schulz reflection method Absorption coefficien 133.0 1/cm Thickness 0.2 Cm 2Theta 38.58 deg. 1/Kt Profile |
| Defocus file Select |
| Defocus(1) functions file Image: Standardize Make defocus function files by TXT2 Files TextDisp |
| Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocu BB285mm-Slit-1mm-7mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) |
| Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH12mm+Schulz+RSH5mm Search minimum Rp%(Cubic only) O 1/Ra Profile |
| Smoothing for ADC Cycles 2 Veight 4 Disp Standardize OutFiles Asc Ras TXT TXT ValueODFVF-B ValueODFVF-A |
| |

バックグランドの削除を行う。



作成されたファイル

| 🖻 111.ASC | 2014/03/13 7:40 | RINT200077+- | 17 KB |
|---------------------|-----------------|--------------|-------|
| 4 200.ASC | 2014/03/13 7:40 | RINT200077+- | 17 KB |
| 🔤 220.ASC | 2014/03/13 7:40 | RINT200077+- | 17 KB |
| 🗐 111_chFB00S_2.TXT | 2015/10/27 2:12 | テキスト文書 | 22 KB |
| 📳 200_chFB00S_2.TXT | 2015/10/27 2:12 | テキスト文書 | 22 KB |
| 📳 220_chFB00S_2.TXT | 2015/10/27 2:12 | テキスト文書 | 22 KB |
| SLITTTHETAFILE | 2015/10/27 2:12 | ファイル | 1 KB |

6. 2作成されたファイルからDEFOCUSファイルを作成



画面上に DEFOCUS ファイルが表示されます。

| _[Defo | cus file Select |
|-------------------|--|
| | Defocus(1) functions file C*CTR*DATA*O-Cube-Demo*random-OdfPoleFigure*defocus*DEFOCUS_F.TXT |
| | Make defocus function files by TXT2 Files V Standardize TextDisp |
| | Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocu BB285mm-Slit-1mm-7mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) |
| | Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm Search minimum Rp%(Cubic only) I/Ra Profile |
| T | extDisp で DEFOCUS ファイルを確認 |
| | TextDisplay 1.12S C:¥CTR¥DATA¥O-Cube-Demo¥random-OdfPoleFigure¥defocus¥DEFOCUS_F.TXT |
| F | ile Help |
| 1 1 2 2 | lename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 15/10/27 3.10 for DefocusCalc, 11_chFB00S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,0.9968149327711315,0.006767925633436169,-5.198692661302161E-4,1.564 00_chFB00S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,0.9985694682607316,-5.448266268048008E-4,1.1042086629025244E-4,-5.96 20_chFB00S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,1.0041172614989602,-0.008449015375879098,6.732540093798079E-4,-2.481 |

🛃 TextDisplay 1.12S C:¥CTR¥DATA¥O-Cube-Demo¥random-OdfPoleFigure¥defocus¥DEFOCUS_F.TXT

File Help

efocusCalc,

436169,-5.198692661302161E-4,1.564247035322984E-5,-1.8510950420925636E-7,4.933516915204654E-10,38.58 3008E-4,1.1042086629025244E-4,-5.967820859239053E-6,1.4104801521259416E-7,-1.253345280018964E-9,44.82 5879098,6.732540093798079E-4,-2.4814551344118E-5,4.2093461977014E-7,-2.6941108825583866E-9,65.18

各行の先頭に指数、スリット幅、最後に2 θ 角度が配置されていることが重要です。 バージョンの古い ODFPoleFigure ソフトウエアでは異なります。

7. 配向試料の極点処理

Random 試料と同じスリット条件で測定した配向試料の極点測定

| ₩ {1,1,1}14365.75 X # {2,0,0}8370.87 X ¥ {2,2,0}2832.07 X |
|---|
| |
| |
| |
| |
| |
| Image: Control of the second |
| File Linear(absolute) ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% |
| ASC(RINT-PC) II1_REVDBraw ASC 200_REVDBraw ASC 220_REVDBraw ASC II1_REVDBraw ASC 200_REVDBraw ASC |
| Calcration Condition Previous Next C.#CTR#DATA#O-Cube-Demo#111_REVDBraw ASC |
| Backgroud delete mode Backgroud delete mode Smoothing Smoothing Smoothing Disp Disp |
| Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm V PeakSlit / BGSlit BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp |
| AbsCalc |
| Defocus fill Select |
| Depocus(1) functions file C*CTR#DATA#O-Cube-Demo¥random-OdfPoleFigure¥defocus*DEFOCUS_F.TXT Multip deformer files hu TVT3 Files = Standardize TextDisn |
| |
| Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocu BB285mm-Slit-1mm-7mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) |
| Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH12mm+Schulz+RSH5mm V Search minimum Rp%(Cubic only) I/Ra Profile |
| Smoothing for ADC Cancel Calc Exit&ODF ODF |
| ValueODFVF-B ValueODFVF-A |
| |
| |
| バックグランド削除 |
| d e f ø u s 伸止 把按U |
| |
| いて がっ 取り しつ ひの 取り しつ ひの 取り しつ ひの 取り しつ ひの |
| |
| |
| |
| |
| |
| |
| |
| |
| Search Rp% (1,1,1) 3.25% -> 1.79% (2,0,0) 3.48% -> 3.45% (2,2,0) 2.04% -> 2.38% Filemake success!! |

8. 最適化処理の確認

最適化する前

ValueODFVF-B



最適化後



R p %の最適化は、処理前が2.9%、処理後は2.5%に改善されています。 使用した**R** p %最適化パラメータ

| o | Points | 3 |
|---|--------|------------------|
| | Step | 0.5 |
| | ок | |
| | | 0 Points Step OK |

| Cancel | Ca | c | Exit&ODF | ODE |
|--------|----|---|----------|-----|
| | | | | |

9. ODF向けファイルの作成

Material で Aluminum を選択

| File Option Symmetric Software Data |
|--|
| Attree constant Initialize Material Start Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) • eetHKL<-Filename |
| Material Start Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) eetHKL<-Filename file Help Disp File Help Disp Search Cubic Ill LaboTex Wave length genth < |
| Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) a 1.0 File Help Disp Search Cubic a 111 LaboTex Wave length D |
| A MaterialData 1.33XT[16/03/31] by CTR File Help Disp File Help Disp See Cubic Ill LaboTex Wave length O Variable |
| a 1.0 File Help Disp PF Data Search Cubic image: a 200 Wave length 0 |
| PF Data Search Se Cubic I111 LaboTex Wave length 0 |
| Se Cubic E Select 1111 LaboTex 0 0 Wave length 0 0 |
| 200 Wave length 0 0 |
| 200_ Wave length 0 V |
| |
| 1.54056 |
| Select |
| Aluminum.TXT |
| |
| |
| |
| |
| |
| |
| Disp Cancel Return Structure |
| |
| DDF を選択して |
| |
| File Option Symmetric Software Data |
| Outcide toxt()(actor) |
| Start |
| Inside text |
| *Labotex CW |
| Stadard ODF alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0 |
| Siemens |
| TexTools(txt) hk,I 2Theta Alfa Area AlfaS AlfaE Select |
| *TexTools(pol) CCW |
| TexTools(pol) CW |
| *popl A(RAW) CW |
| |
| 2,1,1 0.0 0.0 0.0 |
| StandaradODF2.5 |
| Bunge(PF) |
| MulTex(TD:beta=0)CCWTXT2 |
| 3,3,1 0.0 0.0 0.0 |
| Labotex CCW |
| Labotex CCW 4,2,2 0.0 0.0 0.0 0.0 |
| Labotex CCW 4,2,2 0.0 00 00 5,1,1 0.0 00 00 |
| Labotex CCW 4,2,2 0.0 0.0 0.0 Image: Comparison of the state of |
| Labotex CCW 4,2,2 0.0 00 00 Image: Comparison of the state of |
| Labotex CCW 4,2,2 0.0 0.0 0.0 Image: Comparison of the state of |
| Labotex CCW 4.2.2 0.0 0.0 0.0 Image: State of the state of t |
| Labotex CCW 4,2,2 0.0 0.0 0.0 Image: State of the save 5,1,1 0.0 0.0 0.0 0.0 Image: State of the save 5,3,1 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 Image: Symmetric type Full Epf file save AL-Demo AL-Demo |

| 퉬 random-OdfPoleFigure | 2015/10/27 2:16 | ファイル フォル… | |
|-----------------------------|-----------------|--------------|-------|
| J CTRODF | 2015/10/27 2:38 | ファイル フォル… | |
| 🌗 LaboTex 🔍 | 2015/10/27 7:40 | ファイル フォル… | |
| 111_REVDBraw.ASC | 2015/10/26 8:26 | RINT200077+- | 16 KB |
| 🔄 200_REVDBraw.ASC | 2015/10/26 8:31 | RINT200077+- | 15 KB |
| 🖻 220_REVDBraw.ASC | 2015/10/26 8:34 | RINT200077+- | 15 KB |
| 111_REVDBraw_chB00D1S_2.TXT | 2015/10/27 2:38 | テキスト文書 | 22 KB |
| 200_REVDBraw_chB00D1S_2.TXT | 2015/10/27 2:38 | テキスト文書 | 22 KB |
| 220_REVDBraw_chB00D1S_2.TXT | 2015/10/27 2:38 | テキスト文書 | 22 KB |

PFtoODF3 で作成された LaboTex 入力極点図ファイル

| windows7-64 (C:) CTR DATA O-Cube-Demo LaboTex CW | | | | | |
|--|-----------------|------------------|-------|--|--|
| ツール(T) ヘルプ(H) | | | | | |
| 共有 ▼ 書き込む 新しいフォルダー | | | | | |
| | 更新日時 | 種類 | サイズ | | |
| 🔡 Al-Demo.epf | 2015/10/27 7:40 | Exchange Certifi | 35 KB | | |

10. ODF 処理を理解するために

| ODFPoleFigure2 3.43YT[16/03/31] by CTR | | | | |
|--|-------------------------------|---------|--|--|
| File Linear(absolute) | ToolKit Help InitSet BGMode M | easu | | |
| Files select ASC(RINT-PC) | PFtoODF3 | | | |
| Calcration Condition | SoftWare | | | |
| Previous Next | ImageTools | | | |
| Backgroud delete mode- | PopLATools | | | |
| 💟 🔘 DoubleMode 🔘 | ODFAfterTools | | | |
| Peak slit 7.0 mm BQ | PoleOrientationTools | E | | |
| AbsCalc | DataBaseTools | | | |
| Defocus file Select | FiberTools | neien | | |
| Defocus(1) fur | StandardODFTools | ¥0-Cu | | |
| Mał | DefocusTools | les | | |
| | ClusterTools | [pp | | |
| | InverseTools | | | |
| Defocus(2) fur | MeasureDatatoASCTools | DSI | | |
| Smoothing for ADC | OrientationDisplayTools | tandaro | | |
| Cycles 2 V | Veight 4 Veight | / | | |

| PoleOrientationTools 1.05XT[: | 16/ <mark>03/31] by CTR</mark> | |
|---|--------------------------------|-------------------------|
| File Help | | |
| TPF,HPF,TXT,TXT2 Full Polefigure TXT | Orientation | fnd,frd,ftd Display |
| TXT2 Reflection{001} PoleFigure | NDOrientation | fnd Display |
| TXT2 Reflection PoleFigure | CreateExpPoleFigure | fnd,frd,ftd Display |
| TXT2 PoleFigure | RandomLevelCalc | Cr Display |
| TXT2 Trans,Reflection polefigureTXT2 | PFConnection | Complete polefigure |
| TXT2 PoleFigure TXT2 | PoleHKLUVWSearch | (α、β),{hkl} <uvw></uvw> |
| TXT2 PoleFigure TXT2 | CTRODF | ODF Polefigure Inverse |
| | | |

CTRODF で予備知識を得ます。

尚、正確な ODF 計算は、LaboTex,TexTools,StandardODF を用いて下さい。

10.1CTRODFで先ほどの極点処理データ(TXT2) 解析

| PoleHKLUVWSearch (α, β) ,{hkl} <uvw< th=""><th>> 《《周く</th><th>X</th></uvw<> | > 《《周く | X |
|--|---|---|
| CTRODF ODF Polefigure In | verse ファイルの場所(I): | 👔 0-Cube-Demo 🔹 🍺 🖻 🖽 • |
| Input polefigures(TXT2) Holder Files Calculation Polefigures | жб. (р. ф. т. | CTRODF random-OdfPoleFigure 1111_REVDBraw_chBODS_2.TXT 200_REVDBraw_chBODS_2.TXT 220_REVDBraw_chBODS_2.TXT 220_REVDBraw_chBODS_2.TXT |
| Result Disp ValueODFVF GPODF | Display | ファイルと名(N): REVDBraw_chB0DS_2.TXT" * 220_REVDBraw_chB0DS_2.TXT" 間((0) ファイルのタイプ(T): *txt,*.Txt,*.TXT 取消 |

Holder,Files,極点図が表示されます。

| 🔏 {111}2.49 📃 🗵 | 4 {100}3.21 | | 23 | ///////////////////////////////////// | | |
|---|-----------------------|---------------------------------------|-----------|--|--------------|----|
| | | | | | | |
| | | | | | | |
| | | | | | | |
| | | | | | | |
| and the second se | | - D. | | | | |
| | | | | 100 | | |
| | | | | | | |
| | | | | | | |
| | | | | | | |
| (1 CTRODE 1 037[16/02/31] hu CTR | | | 1 | | | X |
| CIRODF 1.021[16/03/31] by CIR | and the second second | | - | | | |
| File neip | | | | | | |
| Input polefigures(TXT2) | | | | | | -1 |
| Holder C:\CTR\DA | TA\O-Cube-Demo | | | | | |
| | | | | | | |
| Flies 111_REVDBraw_chB00D1S_2.1 | X1 200_REVDBraw_cht | 300D15_2.1X1 22 | | aw_cnB00D15_2.1X1 | | |
| Calculation | | | | | 2018 | |
| Polefigures 111 - 100 | | · · · · · · · · · · · · · · · · · · · | | •] [] [| •][•• | |
| | | Cala | | | | |
| | L | Calc | | | | |
| | | | | | | |
| Result Disp | | | | | | |
| ValueODFVF | GPODFDisplay | Inve | erseDispl | ay G | PPoleDisplay | |
| | | | | | | |
| | | | | | | |
| | | | | | | |

極点図指数が変更されています。

Calc で計算が始まります。

ODF 解析結果の再計算極点図と ValueODFVF による Rp%評価結果が表示される。

| # {111}2.46 • • × # {100}3.19 • • × # {110}2.87 | ValueODFVF 2.08VFT[16/03/31] by CTR |
|---|---|
| | File Help Resolution: 5.0 EqualAngle TextDisplay |
| | Normalized Polefigure III III C+CTR¥DATA¥O-Cube-Demo¥CTRODF Recalculated Polefigure III III pole.TPF Rpx III III Average= 2.5 % 3.0 % |
| CTRODF 1.01T[16/03/31] by CTR File Help | 1.5 |
| Input polefigures(TXT2) | |
| | -1.5 -3.0 0 Alpha(deg.) 9 |
| ODF 図などは | |
| Result Disp ValueODFVF GPODFDispla | y InverseDisplay GPPoleDisplay |

| ValueODFVF | R p %の確認 |
|---------------|-----------------------------|
| GPODFDisplay | ODF 図から{hkl} <uvw>の決定</uvw> |
| InverseDsipay | ND,TD,RD 方向の方位分布の確認 |
| GPPoleDisplay | 極点図から{hkl} <uvw>の決定</uvw> |

10.20DF 図





↓ 2 断面45度をマウスセンタークリックで↓2 断面=45度単独表示

Brass



Brass:3.3 Cube:6.2 Goss: 6.4 この比率は、定量値(VolumeFraction)ではありません

10.3逆極点図

逆極点への入力ファイルは LaboTex 仕様で作成されています。

InverseDisplay 1.10YT[16/03/31] by CTR

| File Help Inverse[hkl] | 開< | Contraction of the second s |
|------------------------|-------------|---|
| ODF | | |
| LaboTex 🗖 no | ファイルの場所(1): | GTRODF |
| po | - | Inverse.TPF |
| InverseTXTFile | | Pole.TPF |
| | 最近使oた項 | pole-B.TPF |
| Inverse | | |
| Max level | デスクトップ | |
| WindowsWidth | | |
| | | |

| CTRODF 1.01T[16/03/31] by CTR | | | |
|--|---------------------------------------|----------------------------------|--------------------------------------|
| File Help | | | |
| Input polefigures(TXT2) Holder C:\CTR\DATA\O-Cube-Demo Files 111_REVDBraw_chB00D1S_2.TXT 200_REVDBraw_chB00D | D1S_2.TXT 220_REVDBraw_chB00D1S_2.TXT | | |
| Calculation /// InverseDisplay 1.10YT[16/03/31] b | by CTR | | |
| Polefigures 11 File Help Inverse[hki] Other Avera | age OFF Dataexpand OFF | | |
| Order of ODF Ex Result Disp ValueODFV | B StdODF ND CTRODF\Inverse.TPF | TexTools Other | ND • |
| Weight 4 V WindowsWidth 800 | 3D Max-value(Max 1.0) | 0.15 Data Dis 1.5 [hki] Inter | p List Dsiplay ns. InverseDsiplay |

| List Dsiplay [hkl] Intens. InverseDsiplay | の順にクリック |
|---|---------|
|---|---------|



ND 方向は <101>, <001>方向 RD 方向は <001>方向

の密度が高くなっています。

ODF の結果は、

 $\{ 1 \ 1 \ 0 \} < 1 - 1 \ 2 > \\ \{ 0 \ 0 \ 1 \} < 1 \ 0 \ 0 > \\ \{ 1 \ 1 \ 0 \} < 0 \ 0 \ 1 >$

10.4極点図



{110} <1-12>は極点図を回転しないと判明しません。

10. 5PoleHKLUVWSeearchソフトウエア

| | r | PoleOrientationTools 1.05XT[16/03/31] by CTR | | | | |
|---|------------|--|------------------|-------------------------|--|--|
| | | File Help | | | | |
| | | TPF,HPF,TXT,TXT2 Full Polefigure TXT | Orientation | fnd,frd,ftd Display | | |
| ODFPoleFigure2 3.43YT[16/03/31] by CTR | | TXT2 Reflection{001} PoleFigure | NDOrientation | fnd Display | | |
| File Linear(absolute) ToolKit Help InitSet BC | GMode Meas | TXT2 Reflection RelaFigure | | fod frd ffd Display | | |
| ASC(RINT-PC) PFtoODF3 | | | | | | |
| Calcration Condition SoftWare | | PoleFigure | RandomLevelCalc | Cr Display | | |
| Previous Next ImageTools | | Trans,Reflection polefigureTXT2 | PFConnection | Complete polefigure | | |
| Backgroud delete mode - PopLATools | | -TXT2 PoleFigure TXT2 | PoleHKLUVWSearch | (α、β),{hkl} <uvw></uvw> | | |
| ODFAfterTools | ۲ | TXT2 PoleFigure TXT2 | CTRODF | ODF Polefigure Inverse | | |
| Peak slit 7.0 mm BG PoleOrientationToc | ols | | <u></u> | | | |
| | | | | | | |

PoleHKLUVWSeearchよる検索

| PoleHKLUVWsearc | h 2.03XT[16/03/31 | 1] by CTR | - | | |
|--|---|---|-------------------|------------|--------|
| File Help Simulation | n Absolute densit | ty | | | |
| Material select | | | 1 | - | |
| Cubic 🖆 | 』開く | | | _ | |
| TXT2(*2.TXT,*.TX | ファイルの場所(1): 🍑 | CTRODF | | | |
| FileName | 2 最近使った項 の の の の の の の の の の の の の の の の の の | 100_RCALC_2. 110_RCALC_2. 111_RCALC_2. CHECK.TXT | TXT TXT TXT | | |
| -{HKL} | - | ODF.TXT | | | |
| ¥ {1,0,0}4.28 | | 1,0}2.54 | | 1,1,1}2.28 | |
| PoleHKLUVWsearch 2. File Help Simulation A Material select Cubic TXT2(*2:TXT,*.TXT) files s Holde C:\C FileName | 03XT[16/03/31] by CT boolute density elect r TR\DATA\O-Cube-De | r mo\CTRODF | | | |
| 100_RCALC_2.TXT [HKL] {1,0,0} {1,1,0} {1,1,1] | 110_RCALC_2.TXT 1 | 111_RCALC_2.T. | XT | | |
| Manualhkluvw PeakSearch Peak search Peaksearch mi Exclude Ωstart angle | nimum level 0.1 (!=0.0) | Same p Minimum let | peak scope(degree |) 6 | Search |
| HKLUVWSearch | e 7.5 | Manual H | IKLUVW | | |
| Autohkluvw | | | | | |
| Minimum level | 0.9 | Auto H | KLUVW | | |
| | | | | | |

| Autohkluvw | | | | | | | | | | |
|--------------|---------------|------------|-------------|------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|--|
| | Minimum level | | 1.0 | | Auto HKLUVW | | | _結果 | | |
| ***Calc*** | | | | | | _ | | | | |
| | {001}<100> | {013}<100> | {101}<52-5> | {110}<001> | {110}<1-12> | {112}<1-10> | {122}<2-21> | {323}<1-31> | {525}<1-51> | |
| 1,0,0 | 1.0 | 0.33 | 0.5 | 1.0 | 1.0 | 0.33 | 0.33 | 0.66 | 1.0 | |
| 1,1,0 | 1.0 | 0.66 | 0.69 | 1.0 | 1.0 | 0.2 | 0.4 | 0.16 | 0.33 | |
| 1,1,1 | 1.0 | 1.0 | 0.33 | 1.0 | 0.6 | 0.25 | 0.5 | 0.5 | 1.0 | |
| ***Result*** | | | | | | | | | | |
| | {001}<100> | {110}<001> | | | | | | | | |
| 1,0,0 | 1.0 | 1.0 | | | | | | | | |
| 1,1,0 | 1.0 | 1.0 | | | | | | | | |
| 1,1,1 | 1.0 | 1.0 | | | | | | | | |

{110}<1-12>は(1,1,1)が1.0でないので、最終リストにならない

入力極点図と検証極点図を比較する



一致していません。

検出レベルを下げて検証します。

| Autohkluvw | | |
|---------------|-----|-------------|
| Minimum level | 0.9 | Auto HKLUVW |
| | | 結果 |

| ***Calo | C*** | | | | | | | | | | | | |
|---------|--------|----------|------------|-------------|------------|-------------|--------------|-------------|-------------|-------------|--------------|-------------|-------------|
| | {00 |)1}<100> | {013}<100> | {101}<52-5> | {110}<001> | {110}<1-12> | {111}<-1-12> | {112}<1-10> | {113}<1-10> | {122}<2-21> | {213}<-1-42> | {323}<1-31> | {525}<1-51> |
| 1,0,0 | 1.0 | | 0.66 | 0.5 | 1.0 | 1.0 | 0.66 | 0.33 | 0.33 | 0.33 | 0.66 | 0.66 | 1.0 |
| 1,1,0 | 1.0 | | 0.66 | 0.69 | 1.0 | 1.0 | 0.66 | 0.2 | 0.33 | 0.4 | 0.55 | 0.16 | 0.66 |
| 1,1,1 | 1.0 | | 1.0 | 0.66 | 1.0 | 1.0 | 0.57 | 0.25 | 0.25 | 0.5 | 0.42 | 0.5 | 1.0 |
| ***Res | ult*** | | | | | | | | | | | | |
| | {00 |)1}<100> | {110}<001> | {110}<1-12> | | | | | | | | | |
| 1,0,0 | 1.0 | | 1.0 | 1.0 | | | | | | | | | |
| 1,1,0 | 1.0 | | 1.0 | 1.0 | | | | | | | | | |
| 1,1,1 | 1.0 | | 1.0 | 1.0 | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | |

{110}<1-12>が出現

| PoleHKLUVWsearch 2.03XT[16/03/31] by CTR | | | | | | | |
|--|--|---------|---|--------------------|--|--|--|
| File Help Simulation Absolute density | | | | | | | |
| ∟Material select | | Density | • | Absolute density | | | |
| Cubic | | | | Relativity density | | | |
| - TXT9(*9 TXT * TXT) files select 7 | | | | | | | |



Brass, Cube, Goss方位が決定されました。 しかし、定量値は得られません。

11. 無料で入手可能なLaboTex2. 0-DEMO

LaboTex2.0 内部データでd e m o を行う。

| LaboTex - Demo version User | | | | | | | | | | |
|-----------------------------|------|------|-----|----------|------|--------|---|------------|-------|---|
| File | Edit | View | Cal | culatior | n An | alysis | Η | elp | | |
| | ·ŀ D | 2 | ۶ | •••• X | Þ | 6 | ? | III IS OLU | ₩ V % | 😯 |

| Open Project and Sample - U | Jser : Demo version | 8 |
|-----------------------------|---------------------|---|
| Project Name | Sample Name | |
| Demo | Fiber Fibers | |
| | O_Cubic | |

1/4対称でODF解析



Rp%が表示されています。

PFExport で、極点図群をファイル化し、ValueODFVF で評価

| DE Export as Toxt file | 2 ValueODFVF 2.08VFT[16/03/31] by CTR | - • × | | | | | |
|------------------------|--|-------------|---------------|-------|--------|-------|--------|
| | File Help Resolusion:5.0 EqualAngle TextDisplay | | | | | | |
| | Normalized Polefigure 100 111 211 113 C#CTR#DATA#0-Cube-Demo | | | | | | |
| Job No ; Job03 | Pecalculated Polefigure 100 111 211 113 O_Coubic.TPF | | | | | | |
| | Pps 0.5 0.5 0.5 0.5 Protocol | | | | | | |
| Choose Pole Figures : | 3.0 % | 🔏 Value | ODFVF 2.08VF | T[16/ | 03/31] | by CT | R |
| 0 Cubic - CPF - 100 | | File Hel | p Resolusio | n:5.0 | Equal | Angle | TextDi |
| 0_Cubic - CPF - 111 | | Normalized | l Polefigure | 100 | 111 | 211 | 113 |
| 0_Cubic - CPE - 113 | 1.5 | Recalculati | ed Polefigure | 100 | 111 | 211 | 113 |
| 0_Cubic - NPF - 100 | | Ro% | | 0.6 | 0.5 | 0.5 | 0.5 |
| O_Cubic - NPF - 111 | | 1. p | | 11 | 11 | 11 | 11 |
| 0 Cubic - NPF - 211 | | | | | | | |
| O Cubic - NPF - 113 | | | | | | | |
| O Cubic - BPF - 100 | | | | | | | |
| 0 Cubic - BPE - 111 | | | | | | | |
| 0 Cubic - BPE - 211 | | | | | | | |
| O_Cubic - RPF - 113 | | | | | | | |
| 0_Cubic - INV - 100 | 15 | | | | | | |
| O Cubic - INV - 010 | | | C:¥CTR¥I | ΊΑΤΑ | 4¥Ω−i | Cube- | Demo |
| O Cubic - INV - 001 | | | 0.10 II (1) | 21111 | 14.0 | oubo | Donio |
| | | | O_Cubic.1 | ΓPF | | | |
| OK Cancel | -30 | | Aueroge- | 0.5 (| ĸ | | |
| | 0 Alpha(deg.) | 90 | where a fier- | 0.07 | 70 | | |
| L | | | U . | | | | |

ValueODFVF では LaboTex より低い%になります。

ValueODF は方位密度が低い部分を評価しない様にしています。(ValueODFVF の説明書参照)



Cubeの ODF 図と極点図の位置関係



Goss の ODF 図と極点図の位置関係

← ↑ ♡ C ↓ → L Step 5.00 ÷ 8- 90.00 ÷ 8- 45.00 ÷ HKL (1 1 0) UVW [0 0 1]





1 1. 2 VolumeFraction



LaboTex2.1の VolumeFraction は決められた BOX 内の方位密度の和であって、 正確な VolumeFraction ではありません。

12. LaboTex3. 1のModel FittingによるVolumeFraction



正解が得られます。

結晶方位の定量値が同一でも、ODF 値は方位によって異なります。

Table I. Standard Texture of Spherical Components with Gaussian Distribution (b = 12.5 Deg) and Its Multiplicity (Cubic/Orthorhombic) in the 90 × 90 × 90 Deg Region

| Miller Index | Euler | ODF (Maximum | Multiplicit | | |
|-----------------------------|--|---|--------------------|-----|--|
| {hkl} <uvw></uvw> | $\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$ | $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ | at Exact Position) | (m) | |
| Bs, {110}<112> | {35.26 deg, 45 deg, 0 deg} | {54.74 deg, 45 deg, 0 deg} | 130.95 | 2 | |
| Copper, {112}<111> | {90 deg, 35.26 deg, 45 deg} | {0 deg, 35.26 deg, 45 deg} | 130.95 | 2 | |
| S {123}<634> | {58.98 deg, 36.7 deg, 63.44 deg} | {31.02 deg, 36.7 deg, 26.57 deg} | 56.89 | 1 | |
| Goss, {110}<001> | {0 deg, 45 deg, 0 deg} | {90 deg, 45 deg, 0 deg} | 262.22 | 4 | |
| Cube, {001}<100> | $\{\varphi_1 + \varphi_2 = 0 \text{ deg}, 90 \text{ deg}, 180 \text{ deg}, \Phi = 0 \text{ deg}\}$ | $\{\alpha + \gamma = 0 \text{ deg}, 90 \text{ deg}, 180 \text{ deg}, \beta = 0 \text{ deg}\}$ | 262.22 | 4 | |
| Rotated cube, {001}<110> | $\{\varphi_1 + \varphi_2 = 45 \text{ deg}, \\ 135 \text{ deg}, \Phi = 0 \text{ deg}\}$ | $\{\alpha + \gamma = 45 \text{ deg},\ 135 \text{ deg}, \beta = 0 \text{ deg}\}$ | 262.22 | 4 | |
| Rotated Goss, {110}<011> | {90 deg, 45 deg, 0 deg} | {0 deg, 45 deg, 0 deg} | 262.22 | 4 | |
| {111}<112> | {90 deg, 54.75 deg, 45 deg} | {0 deg, 54.74 deg, 45 deg} | 130.95 | 2 | |
| {112}<110> | {0 deg, 35.26 deg, 45 deg} | {90 deg, 35.26 deg, 45 deg} | 130.95 | 2 | |

1078-VOLUME 35A, MARCH 2004

METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A

S < c o p p e r = B r a s s < C u b e = G o s s 1 : 2 : 4

demoデータの結果

Brass: 3. 3 Cube: 6. 2 Goss: 6. 4

は定量値は同じである事がわかります。

材料物性は集合組織の異方性に関係する。

異方性は、結晶方位の分布で定義される。

従来のODFでは、結晶方位の最大値で議論されているが、ODF解析法により

方位最大密度は異なります。(今回の説明には含まれていません)

ODFの方位最大密度では定量値にならない

結晶方位の定量は、LaboTexのModel Function Methodが最適