

# MTEXとCTRソフトウェア

2020年11月12日

*HelperTex Office*

1. 概要
2. XRDデータ
3. EBSDデータ
4. XRD実際の流れ
5. MTEXに読み込む
  5. 1 設定
  5. 2 ODF計算
  5. 3 kernelwidthを5degと10deg比較
  5. 4 halfwidth5degをExportし、調査
  5. 5 ODFのステップ間隔を変えてExportし比較
  5. 6 ODFから再計算極点図とExport
  5. 7 ODF図のExport
  5. 8 逆極点図とExport
6. EBSDのeuler角度リストをMTEXに読み込む
  6. 1 eulerリストからangデータを作成
  6. 2 MTEXに読み込み
  6. 3 EBSDデータからアルミニウムを抽出し、ODF解析

## 1. 概要

CTRソフトウェアでは、XRDデータ、EBSDデータからMTEXで読み込めるデータ変換MTEXで解析したODF、極点、逆極点をExportすれば、各種解析が行えます。MTEXはコマンド操作のため、しばらく使わないと忘れてしまいます。以下に手順を説明します。

## 2. XRDデータ

XRDデータの場合、各種加工が必要になります。

バックグラウンド除去、random試料を用いたdefocus補正を行います。

random試料がない場合、Tenchhoffの理論式による補正を行います。

ODF解析を行う場合、入力極点図とODF解析で作成できる再計算極点図からRp%を計算し入力極点図の良否を判断します。

MTEXで解析の場合、加工データをMTEXで読み込めるデータに変換し、MTEXでODF解析を行い、再計算極点図をExportし、Rp%の評価を行います。

## 3. EBSDデータ

MTEXでは、各社EBSDデータを読み込むインターフェイスがサポートされています。読み込みエラーが発生する場合、euler角リストのテキストをMTEXで読み込めるangデータに変換します。

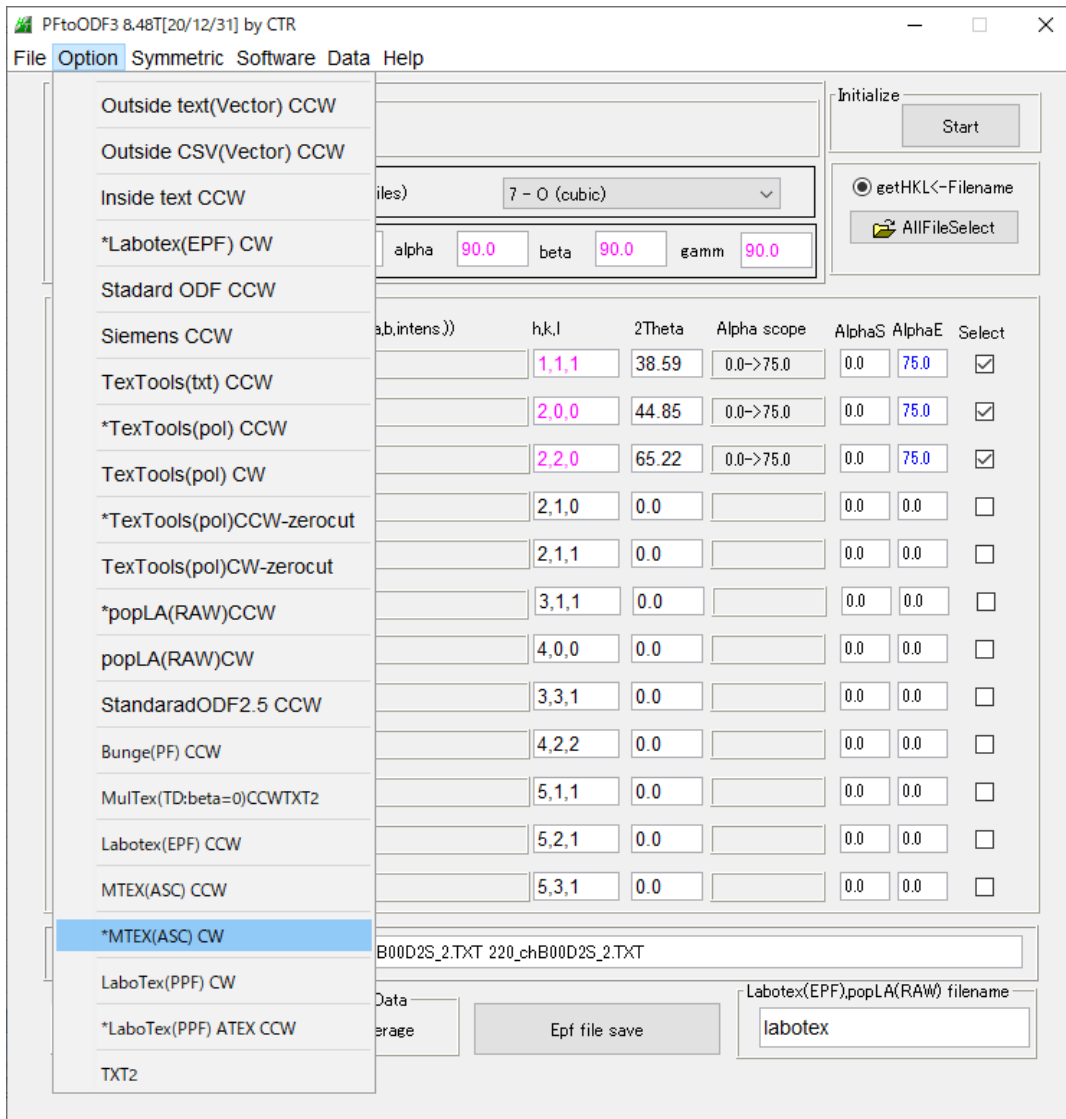
MTEXでODF解析を行います。

#### 4. XRD実際の流れ

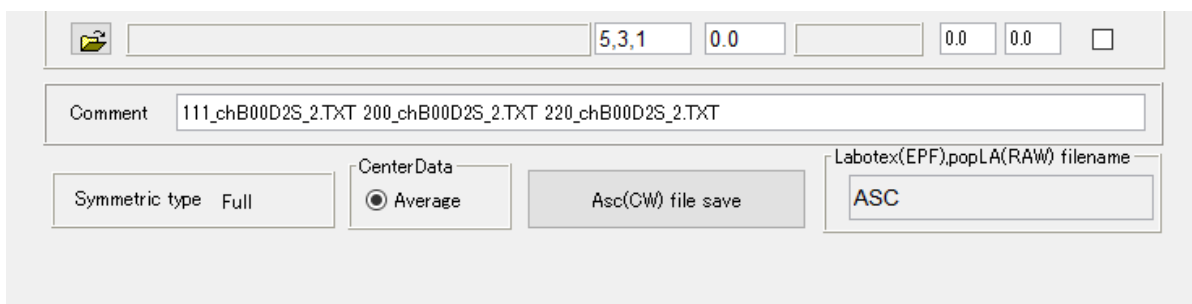
The screenshot illustrates the workflow in the ODF software, divided into several key stages:

- Input Stage:** The top window shows three input pole figures for hkl (1,1,1), (2,0,0), and (2,2,0). These are labeled as **入力極点図** (Input Pole Figures).
- Processing Stage:** The main software window shows the **バックグラウンド処理** (Background Processing) section. Key settings include:
  - Background delete mode:** DoubleMode selected.
  - Defocus correction:** Defocus(2) function files folder (Calc backdefocus) selected, with **defocus補正 (計算による)** (Defocus correction by calculation) noted.
  - Optimization:** **最適化 Rp%** (Optimization Rp%) is set to Free (LimitValue=0.0).
- Result Stage:** The bottom window shows the **処理結果** (Processing Results) as three pole figures for hkl (1,1,1), (2,0,0), and (2,2,0).
- Final Output:** The bottom-most window displays the **Rp%の結果** (Rp% Results) as a line graph of Rp% versus Alpha (deg). The graph shows Rp% values around 2.9, 2.1, and 3.6 for different orientations, with an **Average = 2.8 %**.

Additional annotations include **MTEX入力データ作成 次ページへ** (MTEX input data creation, next page) pointing to the final results window.



Option -> \*MTEX (ASC) CWを選択



極点図データホルダにMTEXホルダが作成され、MTEX入力データが登録されます。

CTR > DATA > Aluminum-H-O > Aluminum-O > MTEX

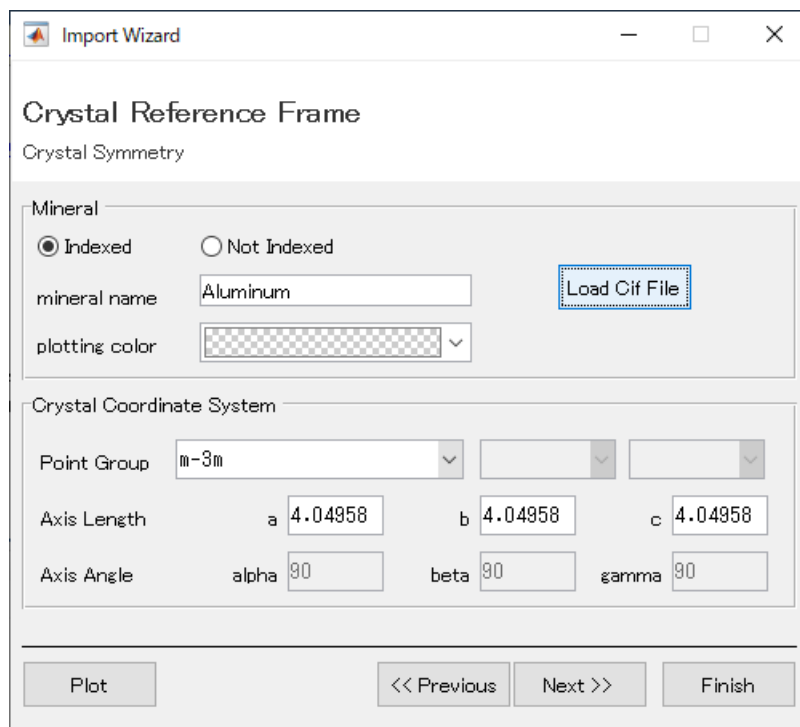
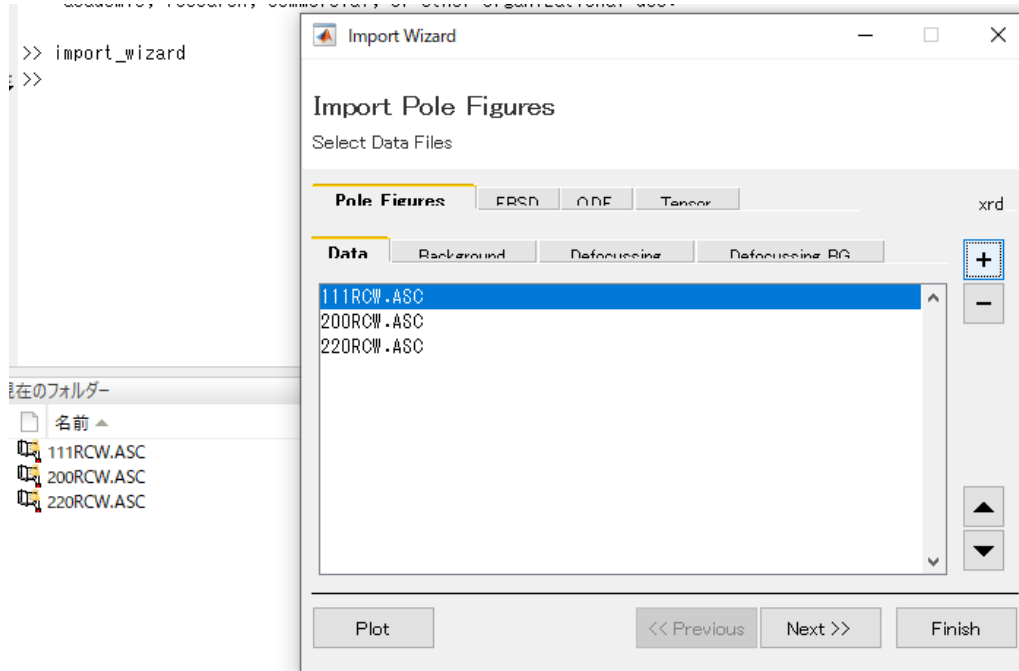
名前	更新日時	種類	サイズ
111RCW.ASC	2020/11/12 5:01	RINT20007スキャン	17 KB
200RCW.ASC	2020/11/12 5:01	RINT20007スキャン	17 KB
220RCW.ASC	2020/11/12 5:01	RINT20007スキャン	17 KB

## 5. MTEXに読み込む

ホルダを指定



## Import\_wizard



c i f を選択

## 5. 1 設定

### %% Specify Crystal and Specimen Symmetries

```
% crystal symmetry  
CS = crystalSymmetry('m-3m', [4 4 4], 'mineral', 'Aluminum');
```

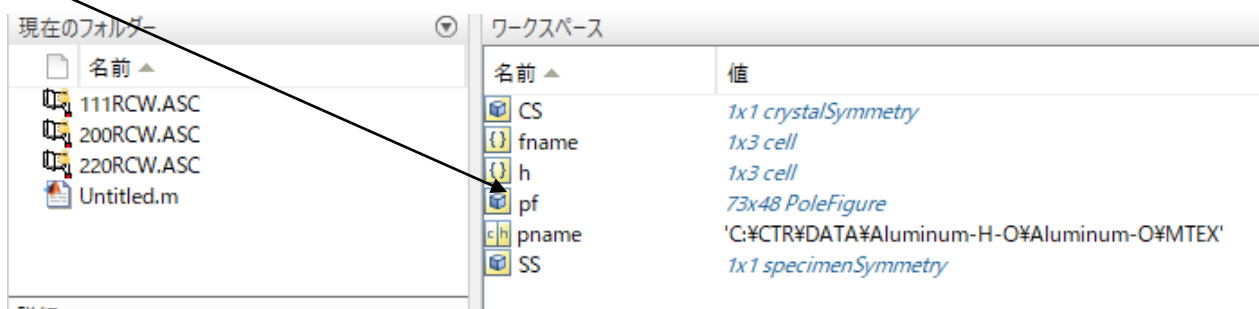
```
% specimen symmetry  
SS = specimenSymmetry('1');
```

```
% plotting convention  
setMTEXpref('xAxisDirection', 'north');  
setMTEXpref('zAxisDirection', 'outOfPlane');
```

SS=specimenSymmetry('orthorhombic')に書き換えるとODF図がOrthorhombicに変わる。  
しかし、ODFをExportすると、( $\phi 1$ ,  $\Phi$ ,  $\phi 2$ )が(85, 90, 85)になり  
 $\phi 1 = 90$ のデータが欠落するので、薦めない



Pfが読み込まれている



## 5. 2 ODF 計算

```
odf = calcODF(pf, <options>)
```

Option:

resolution, kernelwidth, bandwidth

iter\_min, iter\_max

ghost\_correction

halfwidth

```
>> odf=calcODF(pf)
```

では default で計算される

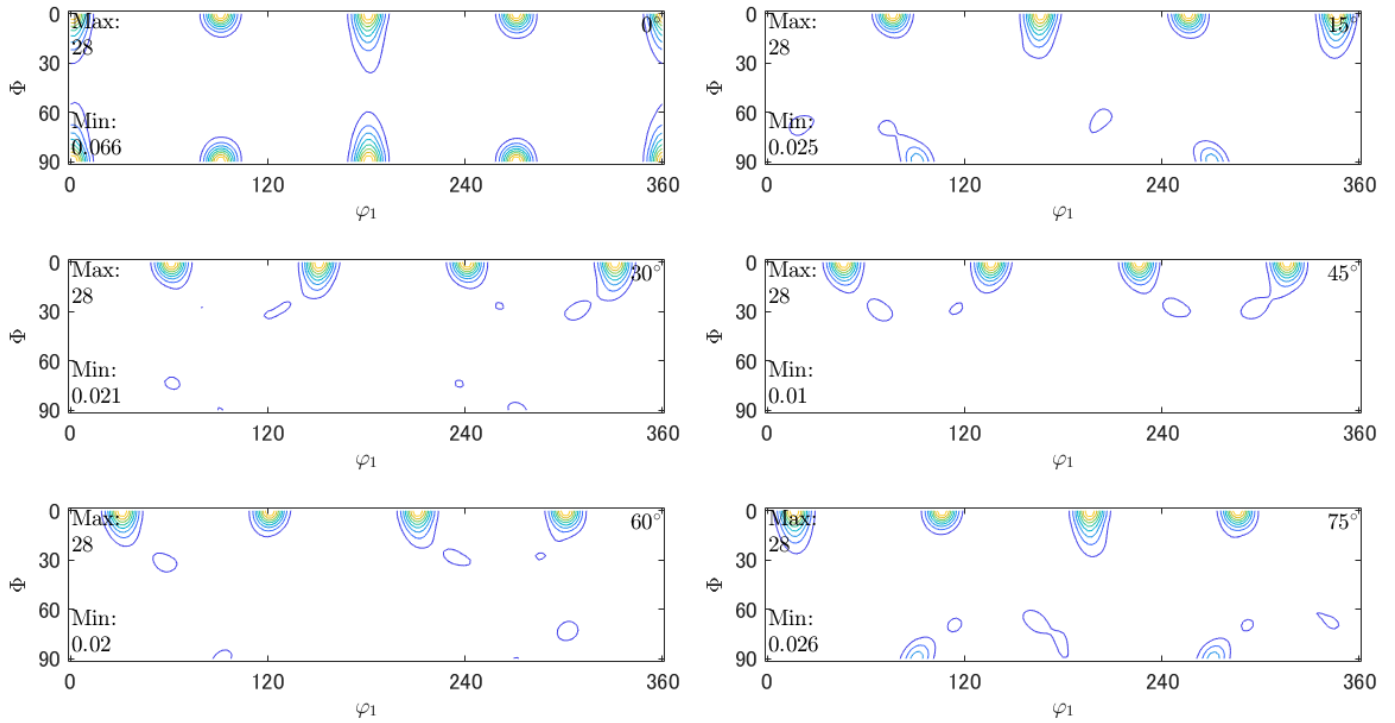
Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°

center: 4954 orientations, resolution: 5°

weight: 1

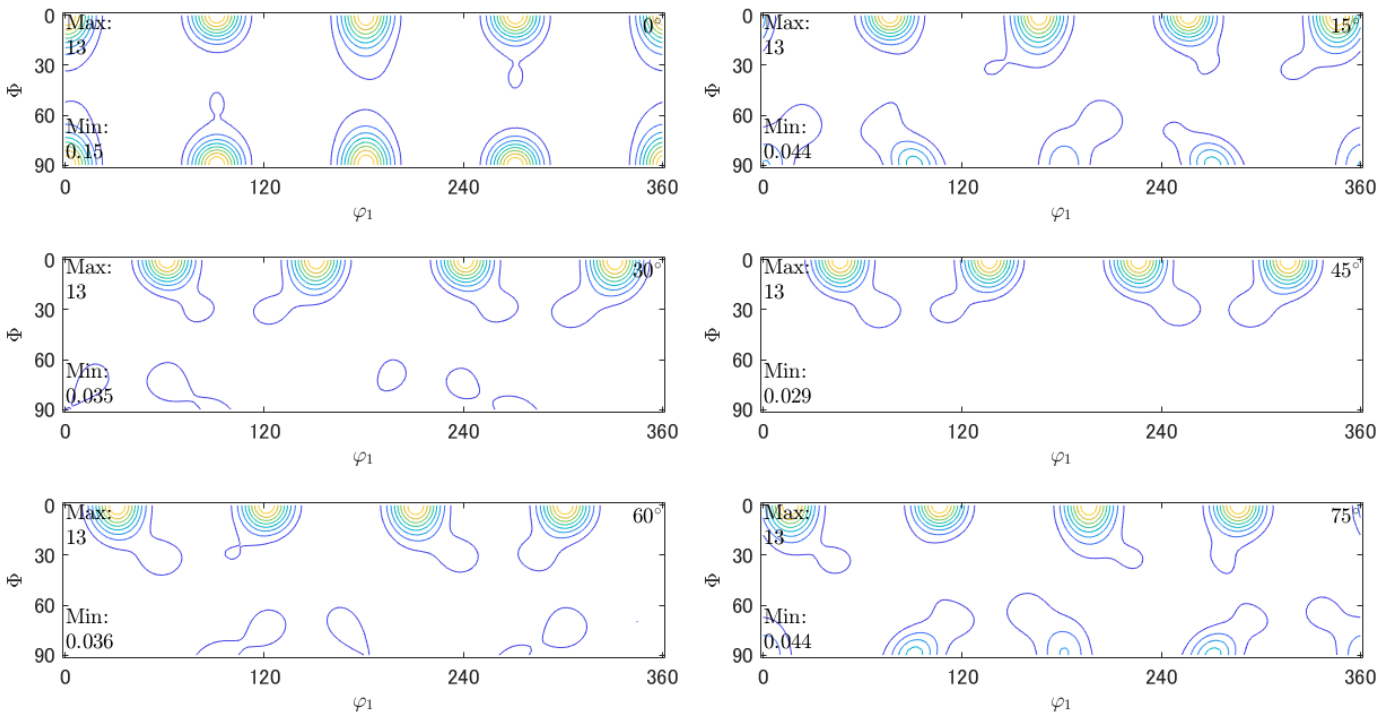
### 5.3 kernel widthを5degと10deg比較



odf10=calcODF(pf,'kernelwidth',10\*degree)

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 10°  
 center: 4938 orientations, resolution: 5°  
 weight: 1



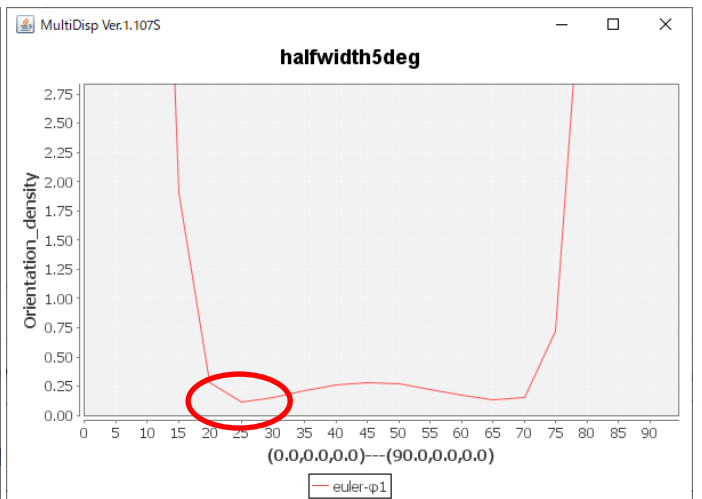
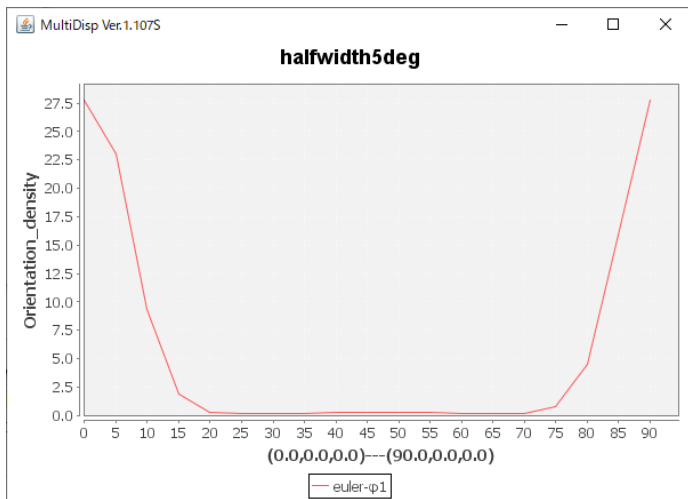
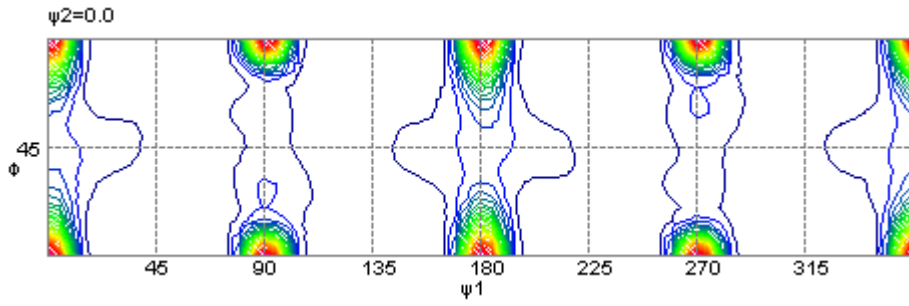
本来、Minはrandomレベルで変化しないが、10degではminがアップしている。

10degのMinが正しい可能性が強い

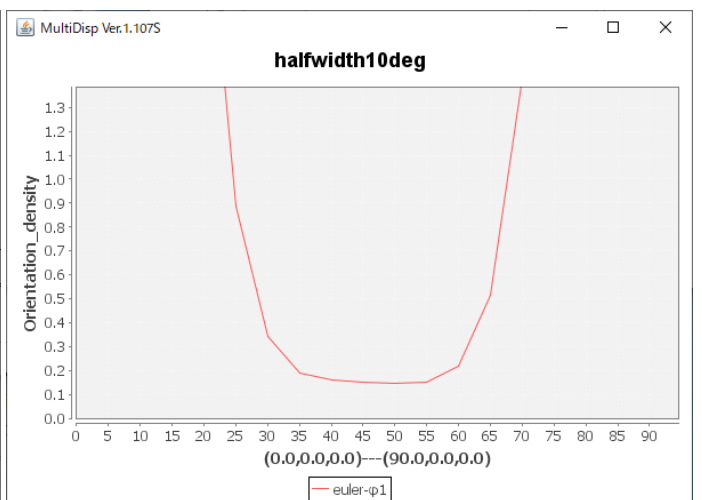
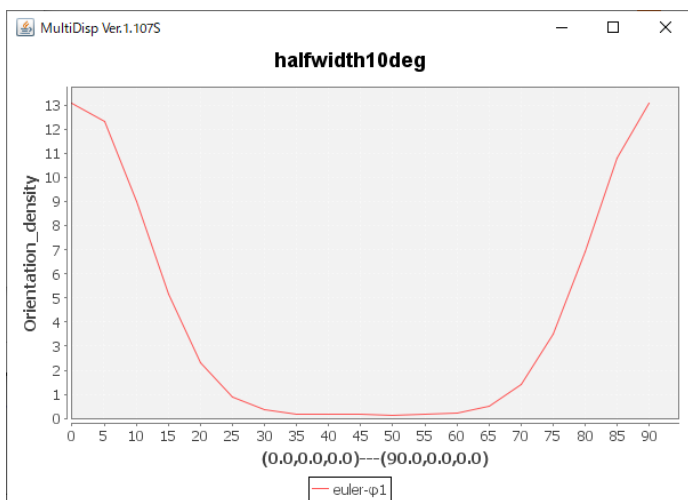
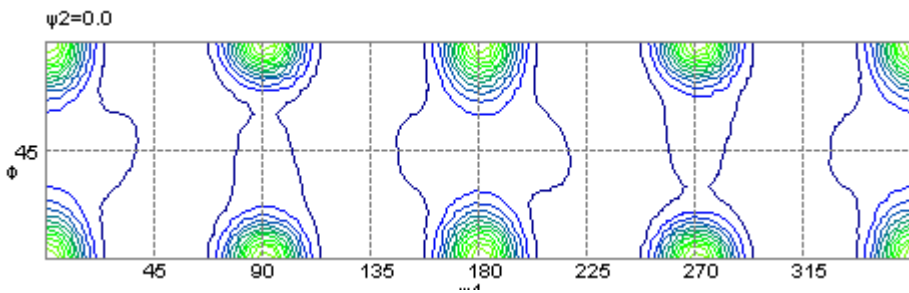
Halfwidthを小さくすると、強い方位の周辺にアンダーシュートの可能性があります。



5. 4 halfwidth5degをExportし、調査  
5deg



10deg (等高線、5degと同一レベル表示)



この現象はH e r m o n i c 法の特徴です。

### 5. 5 ODFのステップ間隔を変えてExportし比較

odf2\_5step=calcODF(pf,'resolution',2.5\*degree,'halfwidth',5\*degree)

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°  
 center: 39551 orientations, resolution: 2.5°  
 weight: 1

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°  
 center: 4954 orientations, resolution: 5°  
 weight: 1



ODFを2.5degで作成し、Exportで2.5指定

export(odf2\_5step,'ODF2.5to2.5.TXT','resolution',2.5\*degree)

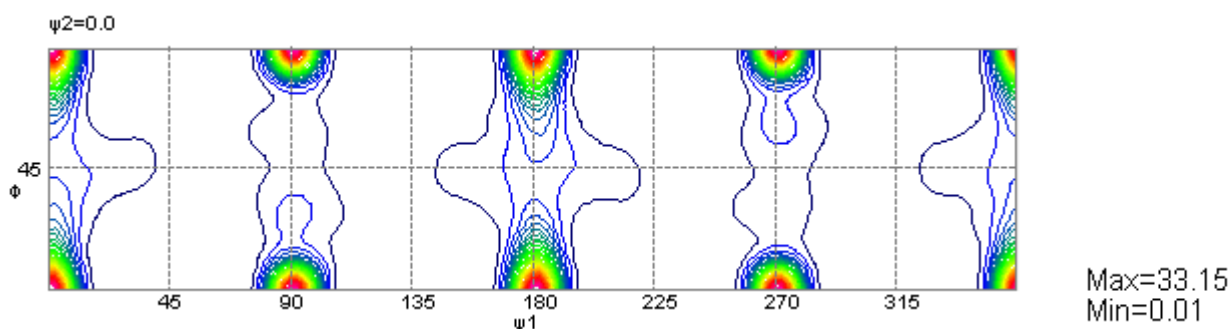
ODFを5degで作成し、Exportを2.5指定

export(odf,'ODF5to2.5.TXT','resolution',2.5\*degree)

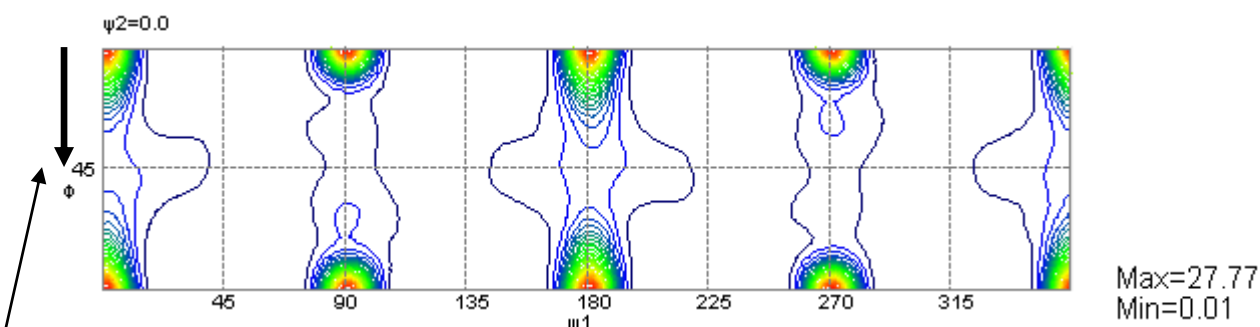
同一サイズデータが作成される

 ODF5to2.5.TXT	2020/11/12 7:30	テキスト文書	6,650 KB
 ODF2.5to2.5.TXT	2020/11/12 7:29	テキスト文書	6,650 KB

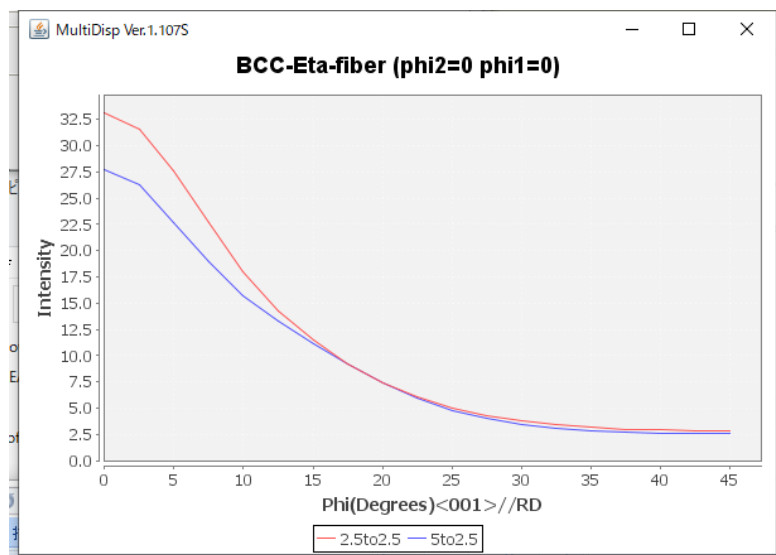
2.5degto2.5deg



5degto2.5deg (等高線レベルは2.5degreeと同一)



$\eta$  - Fiber 比較



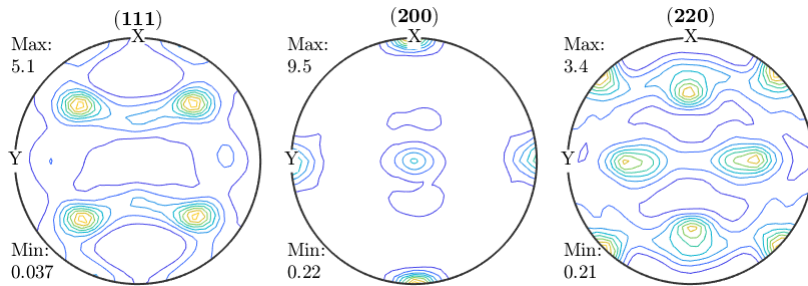
同一半価幅でステップ間隔を狭くすると方位密度が大きくなる  
 より正しい結果が得られます。

## 5. 6 ODFから再計算極点図とExport

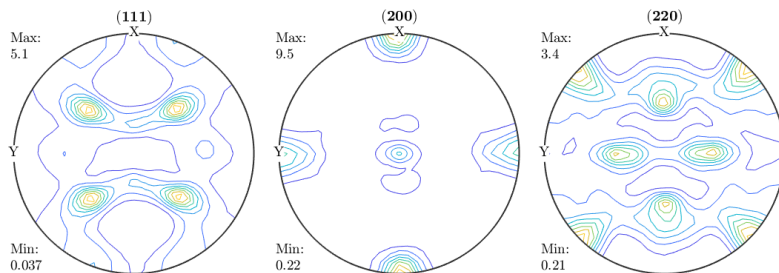
```
rpf = PoleFigure (show methods, plot)
  crystal symmetry : Aluminum (m-3m)
  specimen symmetry: 1
```

```
h = (111), r = 72 x 19 points
h = (200), r = 72 x 19 points
h = (220), r = 72 x 19 points
```

```
plot(rpf,'contour')
```

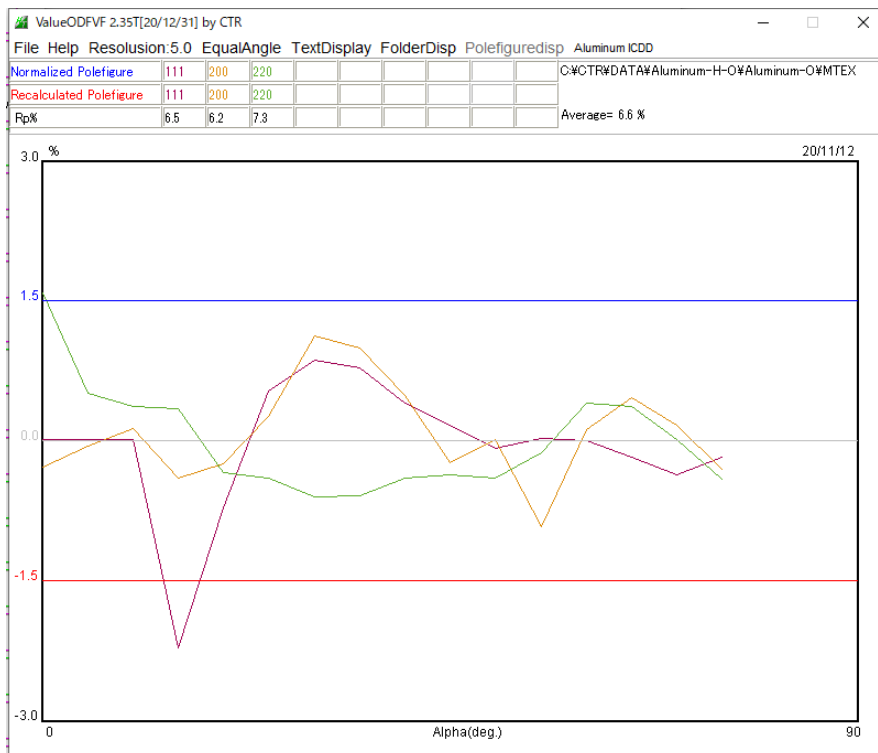


```
plot(rpf,'contour','projection','eangle')
```



再計算極点図をExportしRp%の計算

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

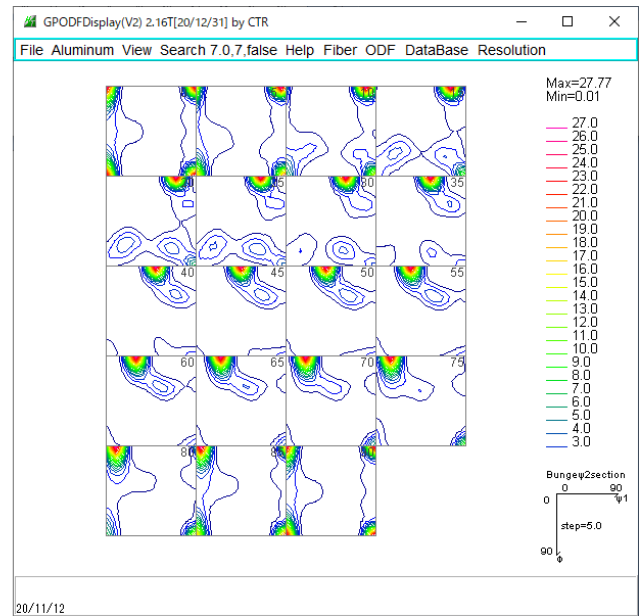
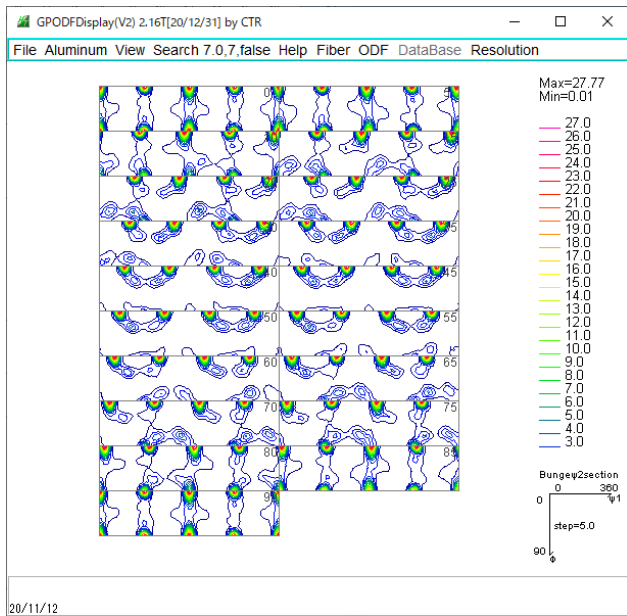


ODFPoleFigure より悪いRp%であるが{111}極図形の密度の低い領域で、MTEXはより低い密度を計算している。  
オーバーシュートが原因と思われる

## 5. 7 ODF図のExport

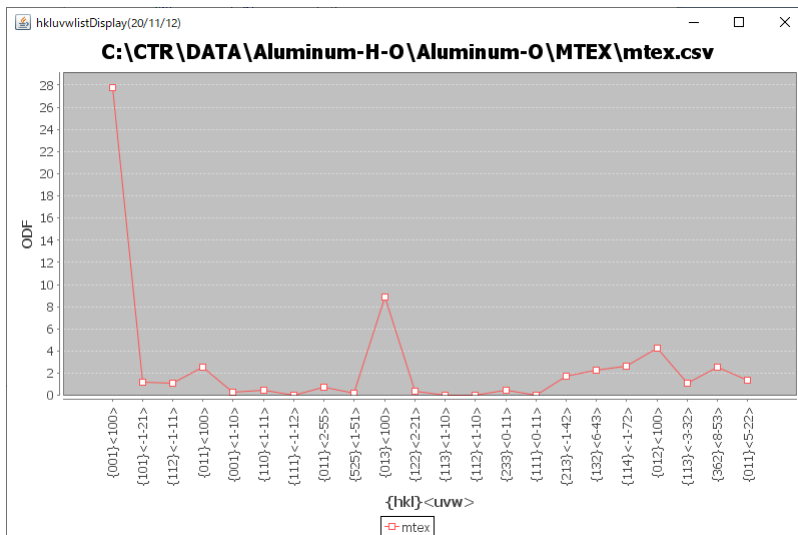
Export(odf,'ODF.TXT')

Triclinic → Orthorhombic

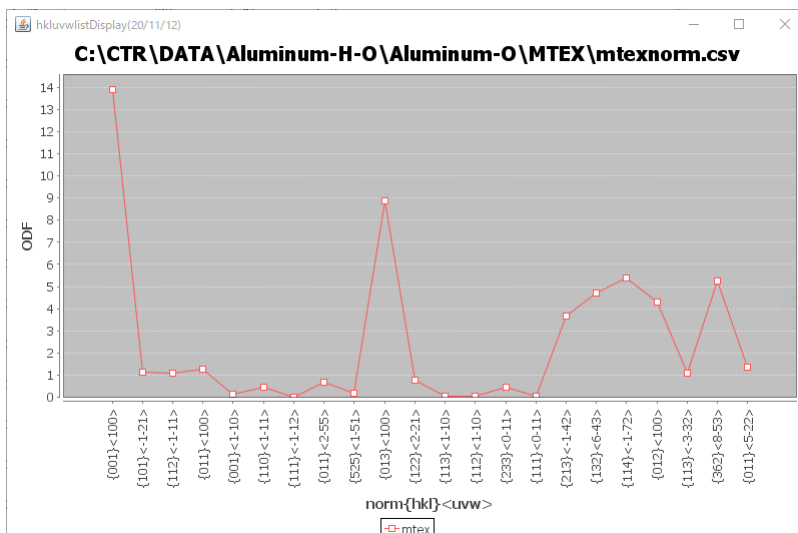


ピークサーチ

f1	F	f2	ODF	calc1	calcF	calc2	hkluvw	EqualDirection
0.0	0.0	0.0	27.77	0.0	0.0	0.0	(0 0 1)[1 0 0] cube	8
MAXODF= 27.77			MINIODF= 0.01					



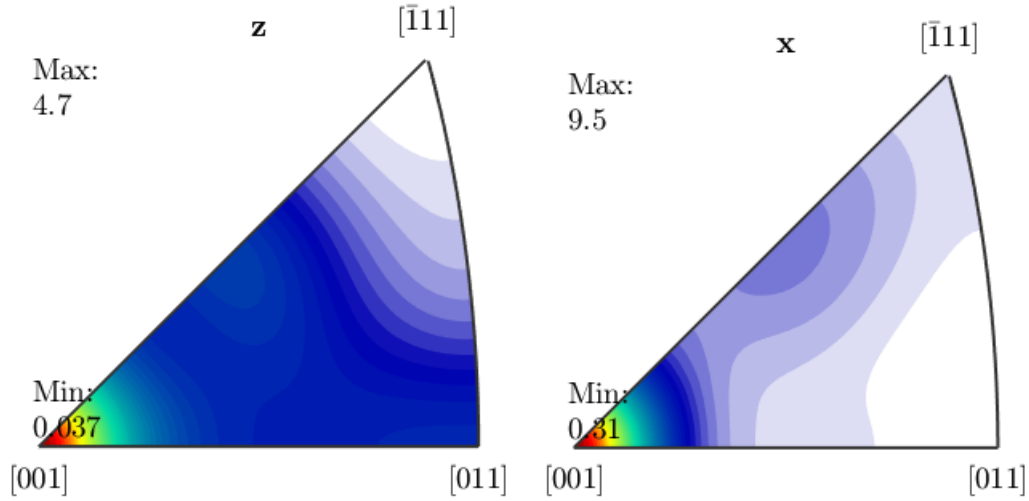
等価の方位の平均値の方位密度



規格化したODF 方位密度の平均値  
 平均値 ← 最大値切り替え  
 euler 角度の位置からは外れる方位は  
 最大値が正しい  
 あるいは、ステップを細かくする  
 4 : 2 : 1 → 1 / 2 : 1 : 2 に変えている

5. 8 逆極点図とExport

plotIPDF(odf,zvector,'projection','eangle')



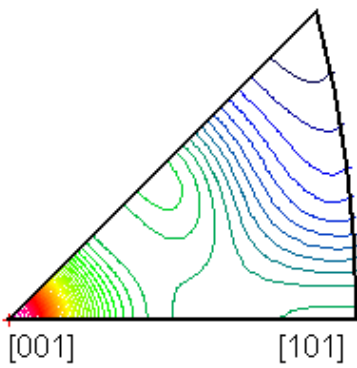
exportIPDF(odf,zvector,'ND.TXT')

ExportIPDF()は、設定でC:\CTR\MTEXを追加する

C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\MTEF

ND

[111]

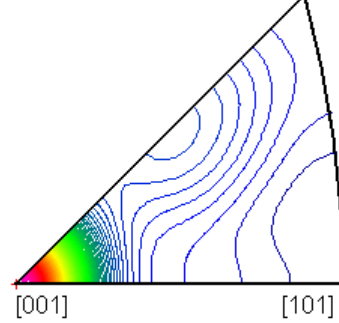


( $\varphi=0.0$ ,  $\beta=0.0$ ) Z=4.74 --> [0,0,1]

C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\MTEX\RD

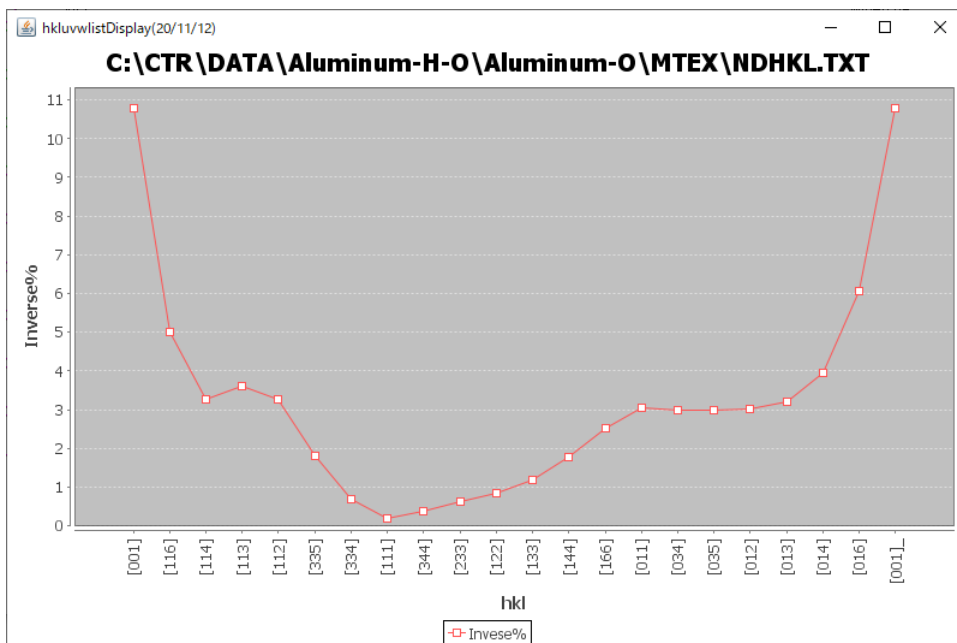
RD

[111]



( $\varphi=0.0$ ,  $\beta=0.0$ ) Z=9.55 --> [0,0,1]

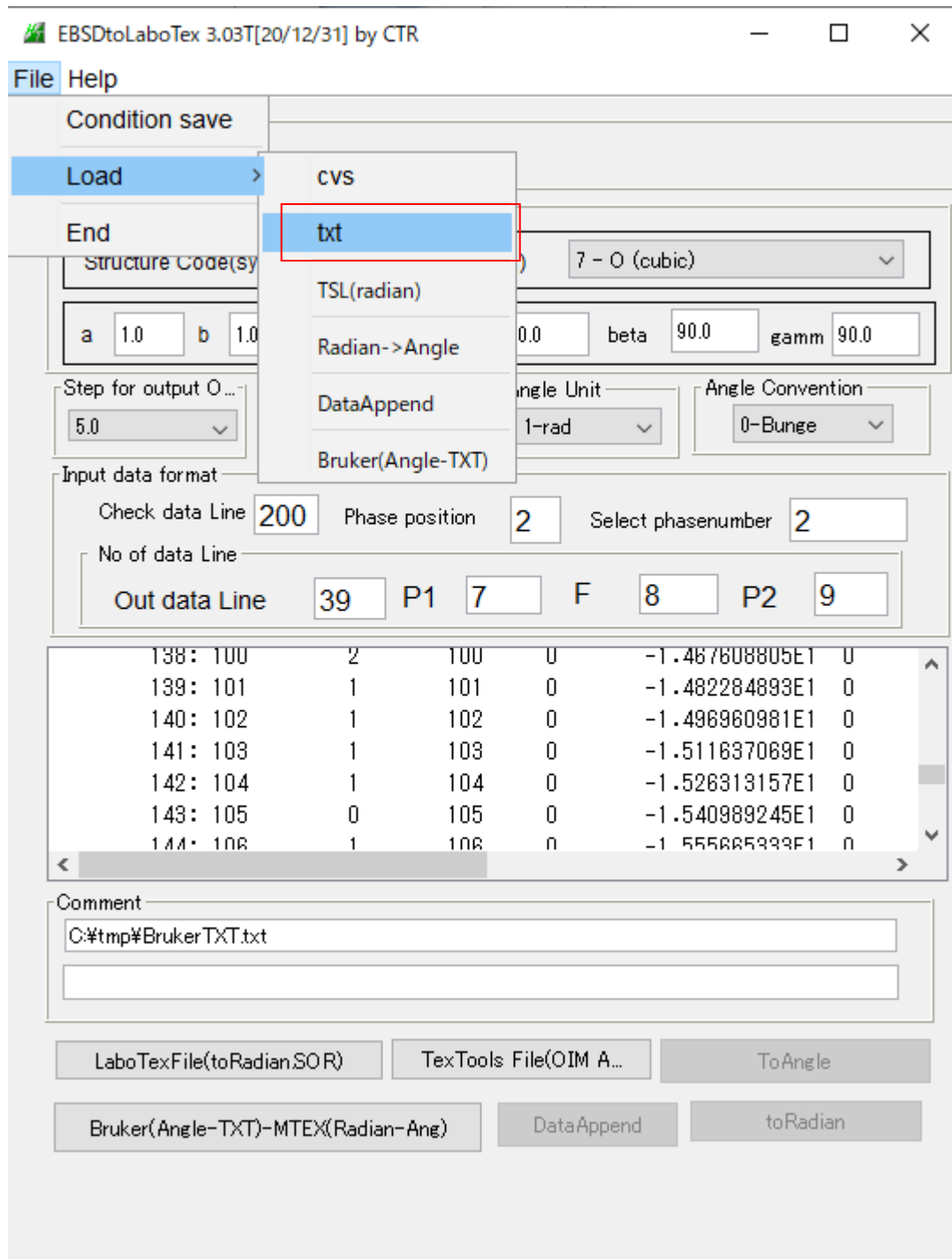
ND方向の方角分布は



6. EBSDのeuler角度リストをMTEXに読み込む

6.1 eulerリストからangデータを作成

MTEXのインターフェイスでErrorの場合、変換します。



LaboTex向け

TexTools向け

MTEX向け

を選択

MTEXのインターフェイスでErrorの場合、変換いたします。

パラメータを選択

EBSDtoLaboTex 3.03T[20/12/31] by CTR

File Help

Material: Aluminum.txt

Lattice constant: Structure Code(symmetries after Schoenflies) 7 - O (cubic)

a 1.0 b 1.0 c 1.0 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Step for output O... 5.0 Weight for data 1-present Angle Unit 1-rad Angle Convention 0-Bunge

Input data format: Check data Line 200 Phase position 2 Select phasenum 1

No of data Line: Out data Line 39 P1 7 F 8 P2 9

Line	h	k	l	g <sub>hkl</sub>	h/g	k/g	l/g	g <sub>hkl</sub> <sup>2</sup>	g <sub>hkl</sub> <sup>-1</sup>
38: 0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
39: 1	1	1	0	-1.467608805E-1	0	0	3.0275	3.0275	3.0275
40: 2	1	2	0	-2.93521761E-1	0	0	3.0203	3.0203	3.0203
41: 3	1	3	0	-4.402826415E-1	0	0	3.0217	3.0217	3.0217
42: 4	0	4	0	-5.87043522E-1	0	0	0	0	0
43: 5	0	5	0	-7.338044025E-1	0	0	0	0	0

Comment: C:\tmp#EBSDDATA#EBSD.txt

LaboTexFile(toRadian.SOR) TexTools File(OIM A...) To Angle

**Bruker(Angle-TXT)-MTEX(Radian-Ang)** DataAppend toRadian

0	0	0	0	0	0	0	100	-1
0	-1.467608805E-1	0	3.027579964E2	3.653832585E1	9.4			
0	-2.93521761E-1	0	3.020324937E2	3.672107379E1	9.4			
0	-4.402826415E-1	0	3.021778401E2	3.642235228E1	9.4			
0	-5.87043522E-1	0	0	0	0	0	0	98
0	-7.338044025E-1	0	0	0	0	0	0	95

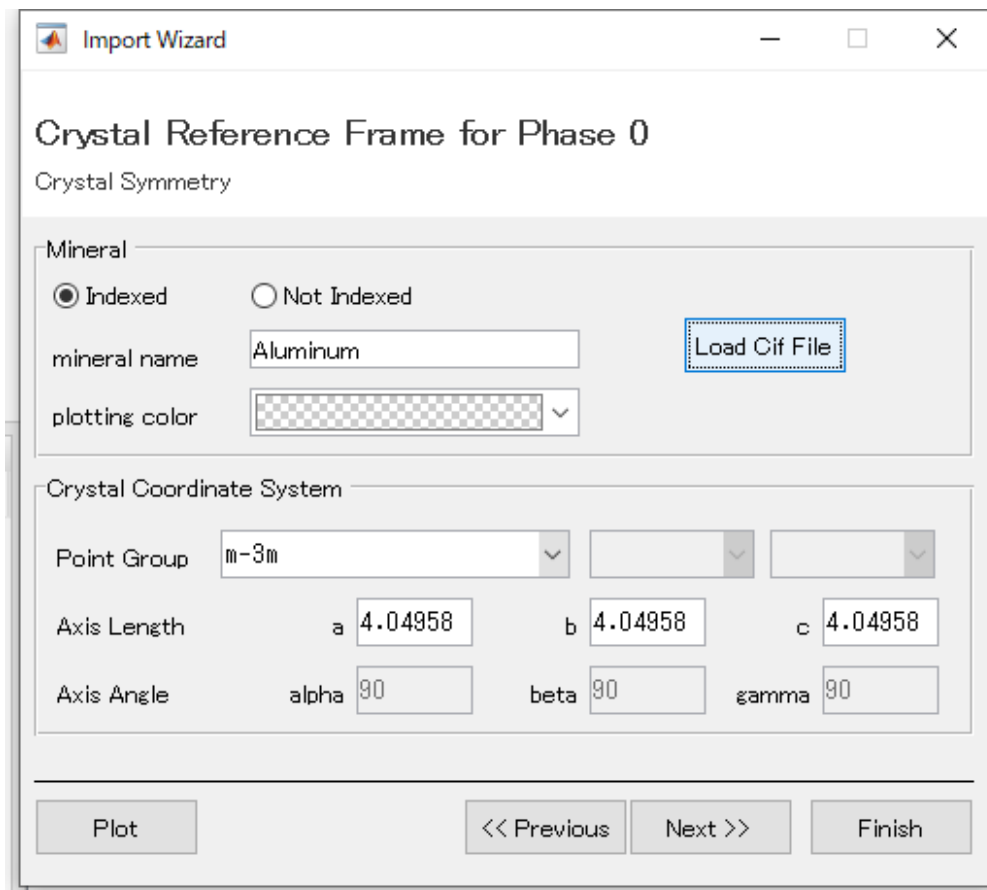
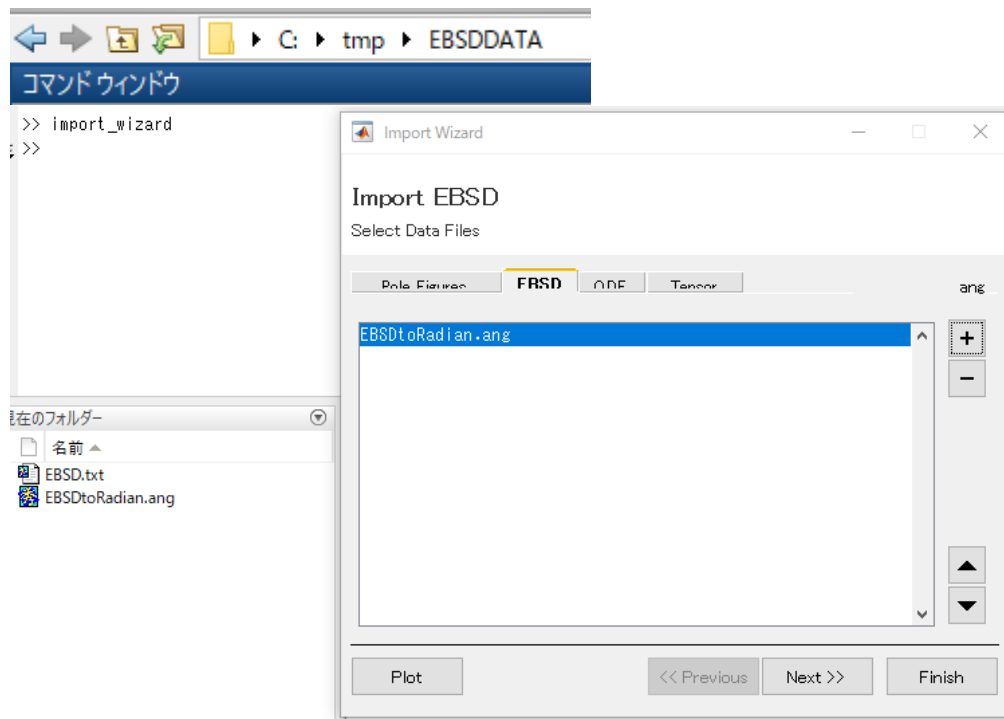
Comment: C:\tmp#EBSDDATA#EBSD.txt

LaboTexFile(toRadian.SOR) TexTools File(OIM A...) To Angle

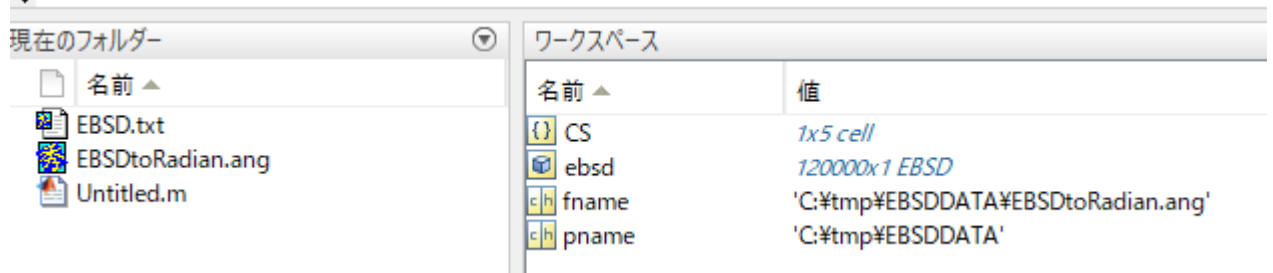
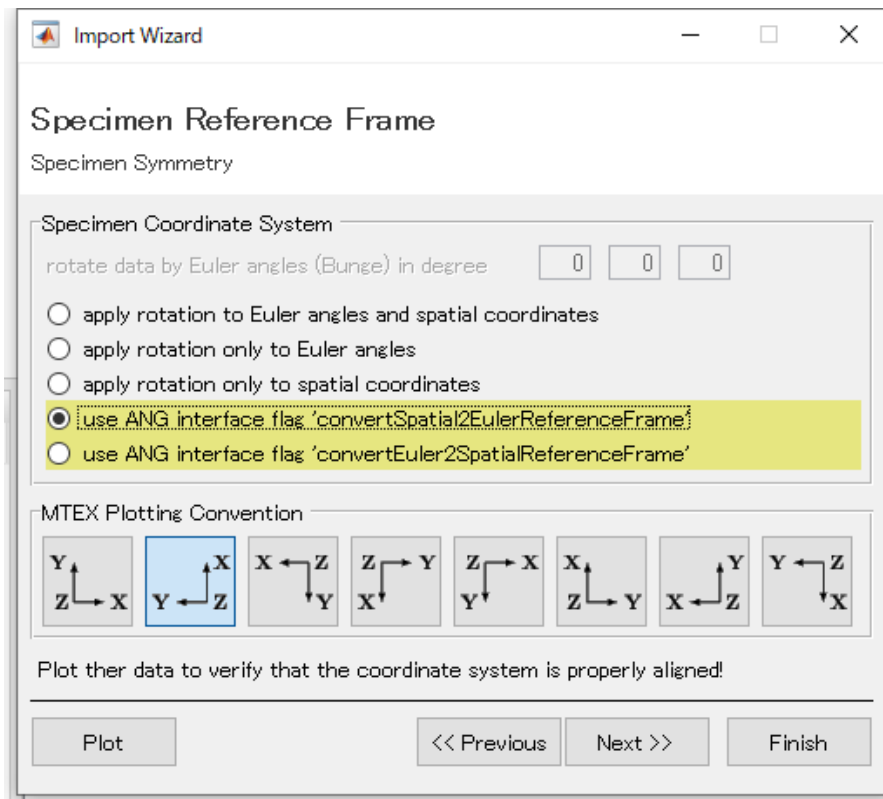
**Bruker(Angle-TXT)-MTEX(Radian-Ang)** DataAppend toRadian

C:\tmp#EBSDDATA#EBSDtoRadian.ang make Complete !!!

## 6. 2 MTEXに読み込み







### 6. 3 EBSDデータからアルミニウムを抽出し、ODF解析

```
>> ans=ebsd('Aluminum')|
ans = EBSD (show methods, plot)
Phase Orientations Mineral Color Symmetry Crystal reference frame
0 119729 (100%) Aluminum LightSkyBlue m-3m
Properties: ci, fit, iq, sem_signal, x, y, oldId
Scan unit : um
>> odf=calcDensity(ans.orientations)
odf = ODF (show methods, plot)
crystal symmetry : Aluminum (m-3m)
specimen symmetry: 1
Harmonic portion:
degree: 25
weight: 1
```

半価幅が不明

```
>> odf10=calcDensity(ans.orientations,'halfwidth',10*degree)
```

```
odf10 = ODF (show methods, plot)
crystal symmetry : Aluminum (m-3m)
specimen symmetry: 1
```

```
Harmonic portion:
degree: 25
weight: 1
```

```
>> odf5=calcDensity(ans.orientations,'halfwidth',5*degree)
```

```
odf5 = ODF (show methods, plot)
crystal symmetry : Aluminum (m-3m)
specimen symmetry: 1
```

```
Harmonic portion:
degree: 48
weight: 1
```

このデータでは、半価幅を指定しない場合、10degで計算されている。

極点図作成

```
cs=ebsd('Aluminum').CS
h=[Miller(0,2,0,cs),Miller(2,2,0,cs),Miller(1,1,1,cs)]
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

**ODFが作成できれば、XRDと同一操作で作業が行えます。**