

EBSDAngdataMakerによるCubicODF解析調査

MTEXでhalfwidth=2deg以下にするとLaboTexと同一なODF図が描画できる。

本資料作成時、EBSDAngMakerにcif-symmetrizedに対応
AngデータをEBSDtoLaboTexへ読み込み時
格子定数、LaboTexStructureCode取り込み
SpaseG.TXTに追加修正を行っています。

2021年01月07日

HelperTex Office

概要

非対称ODF解析に対し、LaboTexでは、以下のCodeで扱っている。

Symmetry		Cubic**		Hexagonal		Tetragonal		Trigonal		Ortho- rhombic	Mono- clonic	Triclinic
		O	T	D ₆	C ₆	D ₃	C ₄	D ₃	C ₃	D ₂	C ₂	C ₁
LaboTex structure code		7	6	11	10	5	4	9	8	3	2	1
φ ₁	triclinic* (C ₁)	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°
	monoclinic* (C ₂)	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°
	orthorhombic*(D ₂)	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°
	axial*	-***	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Φ	90°	90°	90°	180°	90°	180°	90°	180°	90°	180°	180°	180°
φ ₂	90°	180°	60°	60°	90°	90°	120°	120°	180°	180°	360°	

* - sample symmetry

** - there are three non-linear basic region inside described region

*** - for any φ₁ angle

XRDデータでは、Cubicに対し、O-Cubicを優先していた。

EBSDAngdataMakerでデータを作成し、ODF図の比較を行ってみます。

入力データをアルミニウムとする。

```

_pd_phase_name
_cell_length_a
_cell_length_b
_cell_length_c
_cell_angle_alpha
_cell_angle_beta
_cell_angle_gamma
_symmetry_space_group_name_H-M
_symmetry_Int_Tables_number

```

'Al' ↓
4.04958(3).
4.04958(3).
4.04958(3).
90 ↓
90 ↓
90 ↓
'F m -3 m'
225 ↓

Material

Materi... cif Symmetry number 43 Materialname Al

LatticeConstants 4.04958 4.04958 4.04958 90.0 90.0 90.0

MTEX付属cifデータ

```

_space_group_IT_number
_symmetry_space_group_name_Hall
_symmetry_space_group_name_H-M
_[local]_cod_cif_authors_sg_H-M

```

225 ↓
'-F 4 2 3'
'F m -3 m'
'F m 3 m' ↓

```

_chemical_name_mineral
_cell_angle_alpha
_cell_angle_beta
_cell_angle_gamma
_cell_length_a
_cell_length_b
_cell_length_c

```

Aluminum ↓
90 ↓
90 ↓
90 ↓
4.04958 ↓
4.04958 ↓
4.04958 ↓

Material

Materi... cif Symmetry number 43 Materialname Aluminum

LatticeConstants 4.04958 4.04958 4.04958 90.0 90.0 90.0

SpaceコードからSymmetry変換はSpaceG.TXTファイルを参照しています。

Ang データ作成

EBSDataMaker 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

Material

Materi... cif Symmetry number 43 Materialname Al

LatticeConstants 4.04958 4.04958 4.04958 90.0 90.0 90.0

GRID: SqrGrid#

Number 20 400

Data eulerangle(f1,F,f2) angles

<input checked="" type="checkbox"/> 1	200	30	0.000	<input checked="" type="checkbox"/> 2	300	60	0.000
<input type="checkbox"/> 3	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 4	0.000	0.000	0.000
<input type="checkbox"/> 5	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 6	0.000	0.000	0.000
<input type="checkbox"/> 7	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 8	0.000	0.000	0.000
<input type="checkbox"/> 9	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 10	0.000	0.000	0.000

Makefileholder U¥2021-01-07-cube¥Al¥Al.ang

makefile

Ang データ



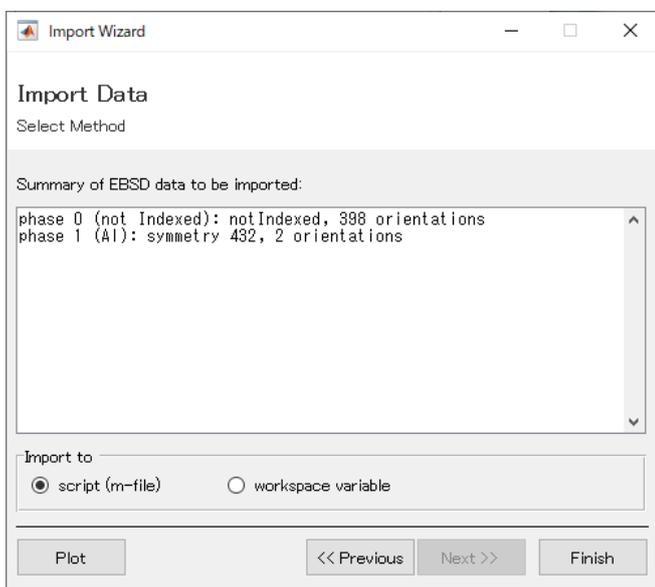
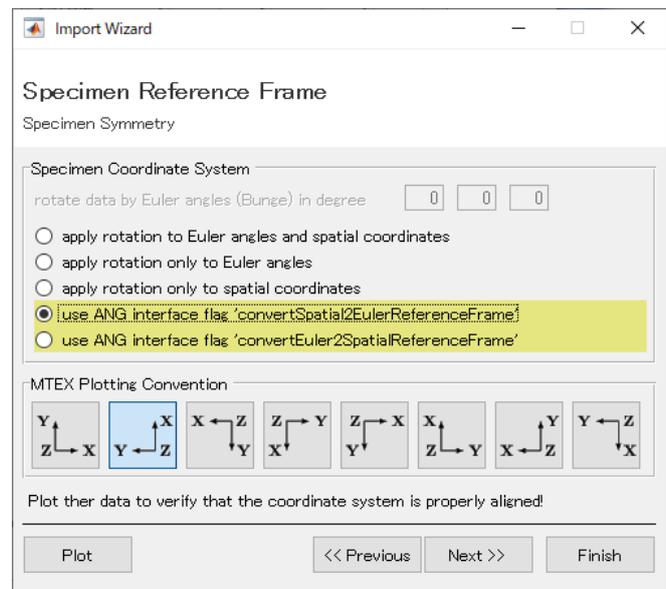
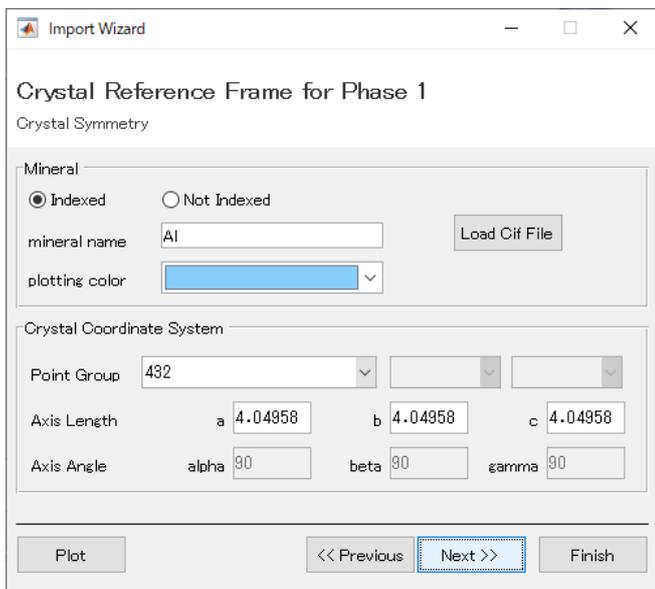
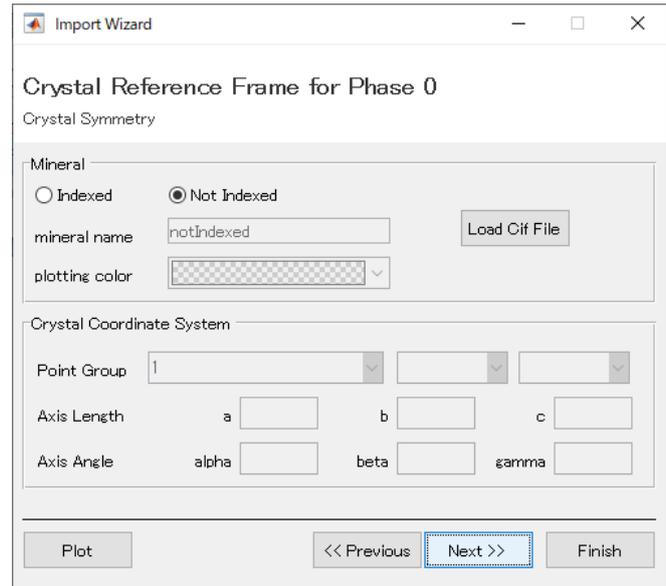
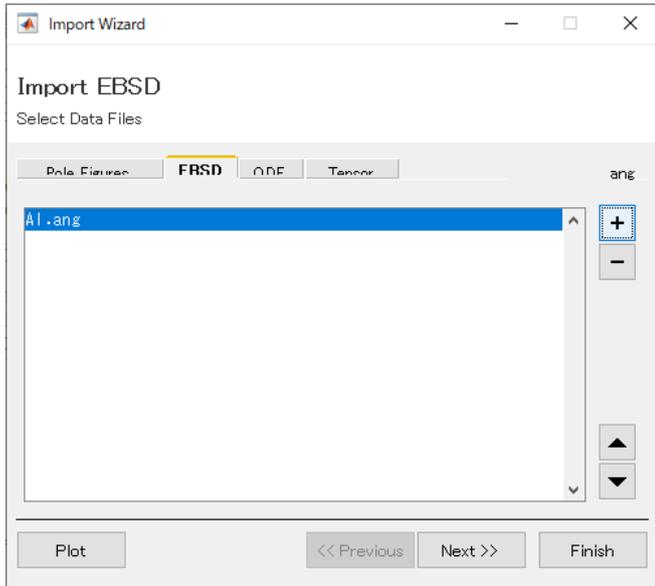
TextDisplay 1.14S U:¥2021-01-07-cube¥Al¥Al.ang

File Help

```
#
# Phase 1
# MaterialName Al
# Formula
# Symmetry 43
# LatticeConstants 4.04958 4.04958 4.04958 90.0 90.0 90.0
#
# GRID: SqrGrid#
3.491 0.524 0.000 0.000 0.000 1.000 1.000 1 1
5.236 1.047 0.000 1.000 0.000 1.000 1.000 1 1
0.000 0.000 0.000 2.000 0.000 1.000 1.000 0 1
```

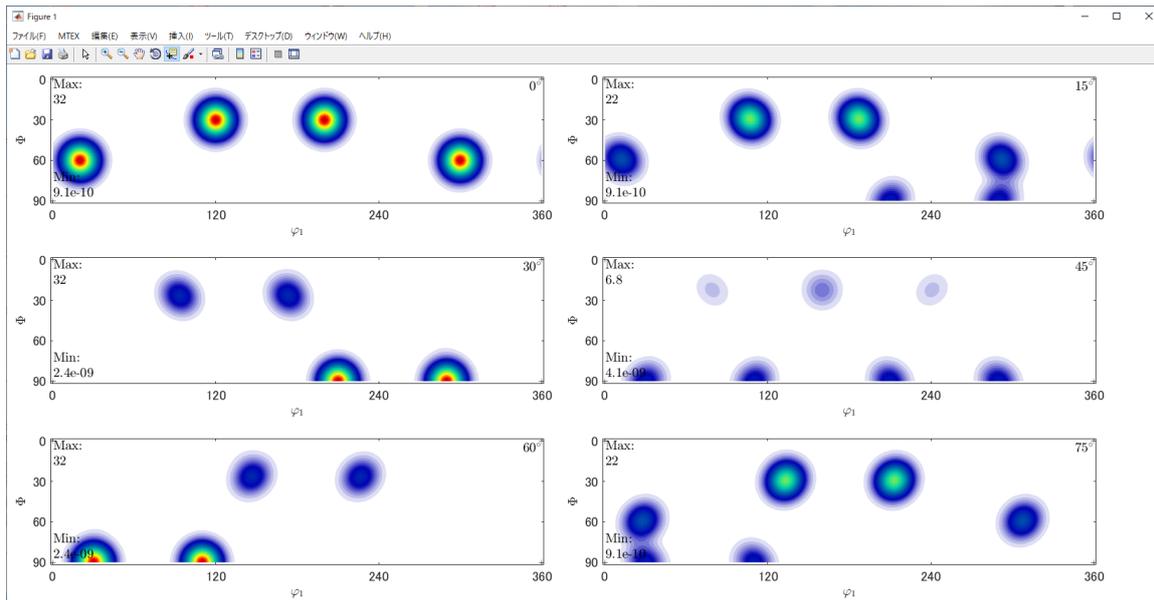
MT E X解析手順

Import_wizard

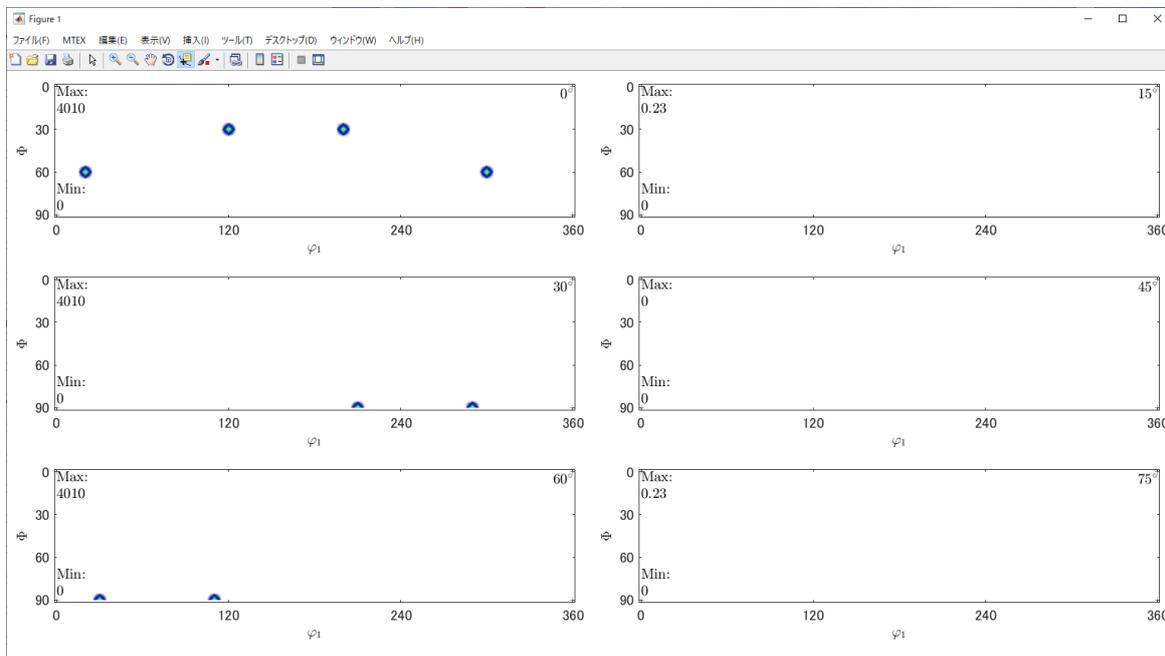


MT E Xで解析結果

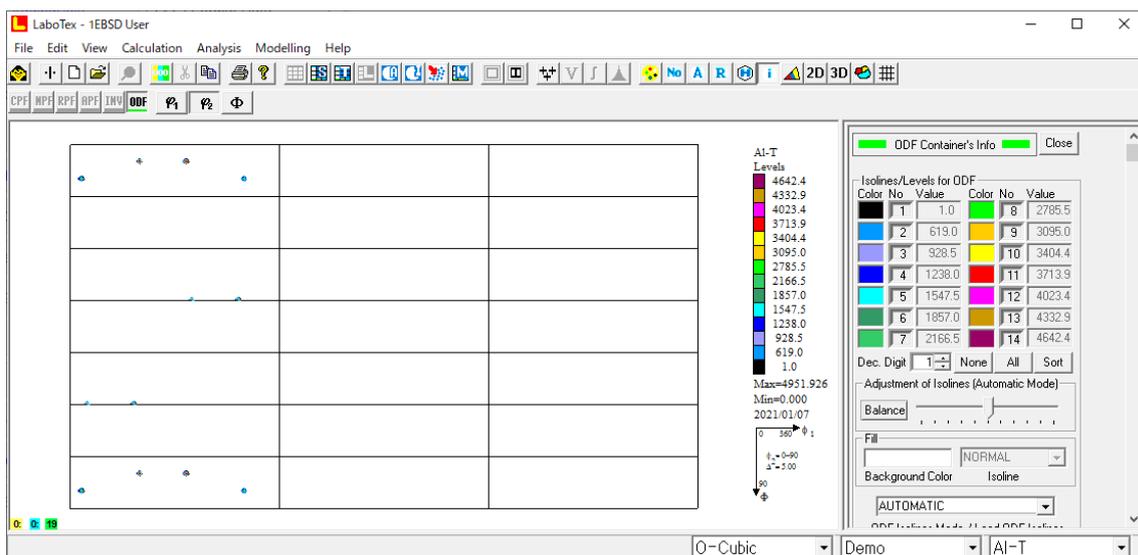
odf = calcDensity(ebsd('Al').orientations)



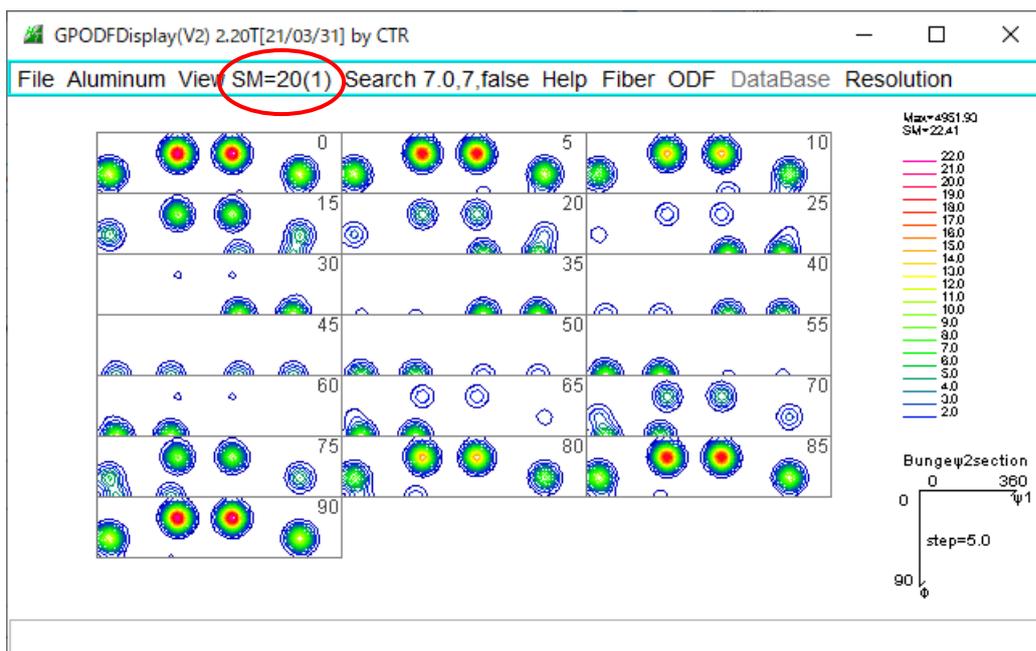
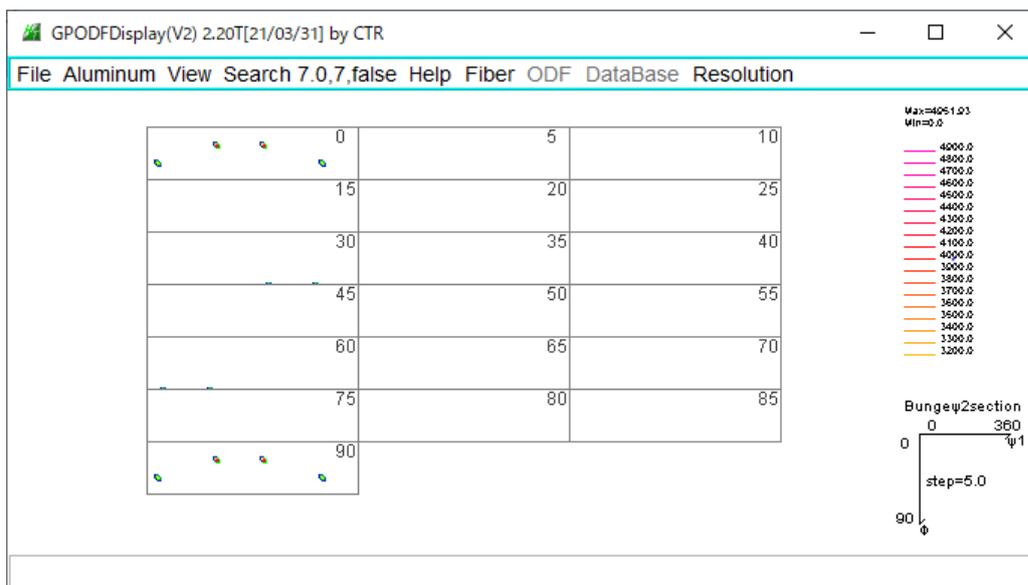
odf = calcDensity(ebsd('Al').orientations,'halfwidth',2*degree)



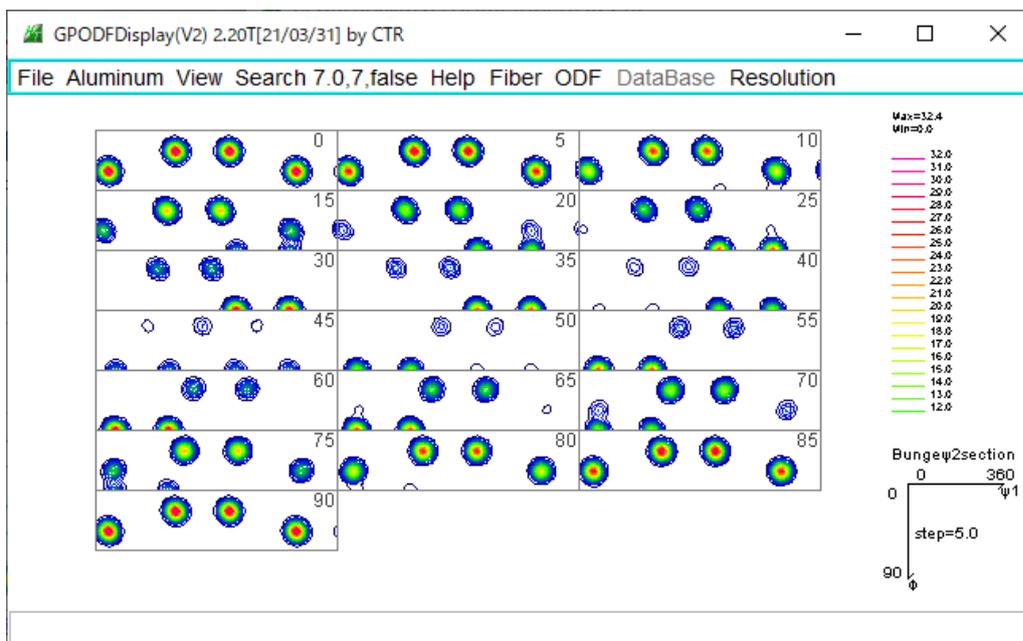
L a b o T e xで解析



LaboTexデータから MTEX(halfwidth=10deg)と似た図を得るに平滑化を行います。



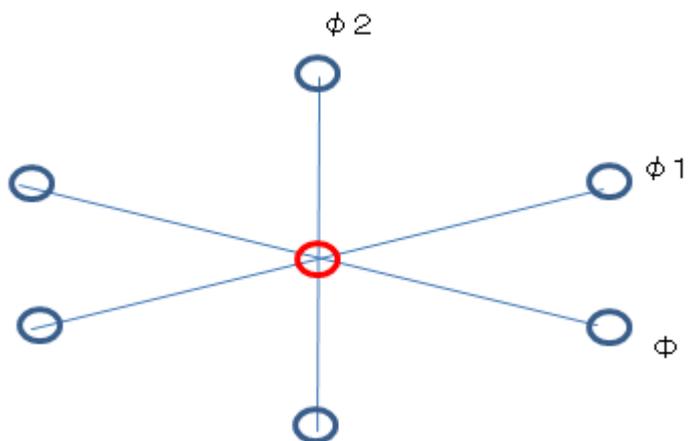
MTEX (Halfwidth=10deg)



GPODF Displayの平滑化 (3D-cube Smoothing)

Euler空間の3次元平滑をパラメータ, `cycle`と`weight`で行います。

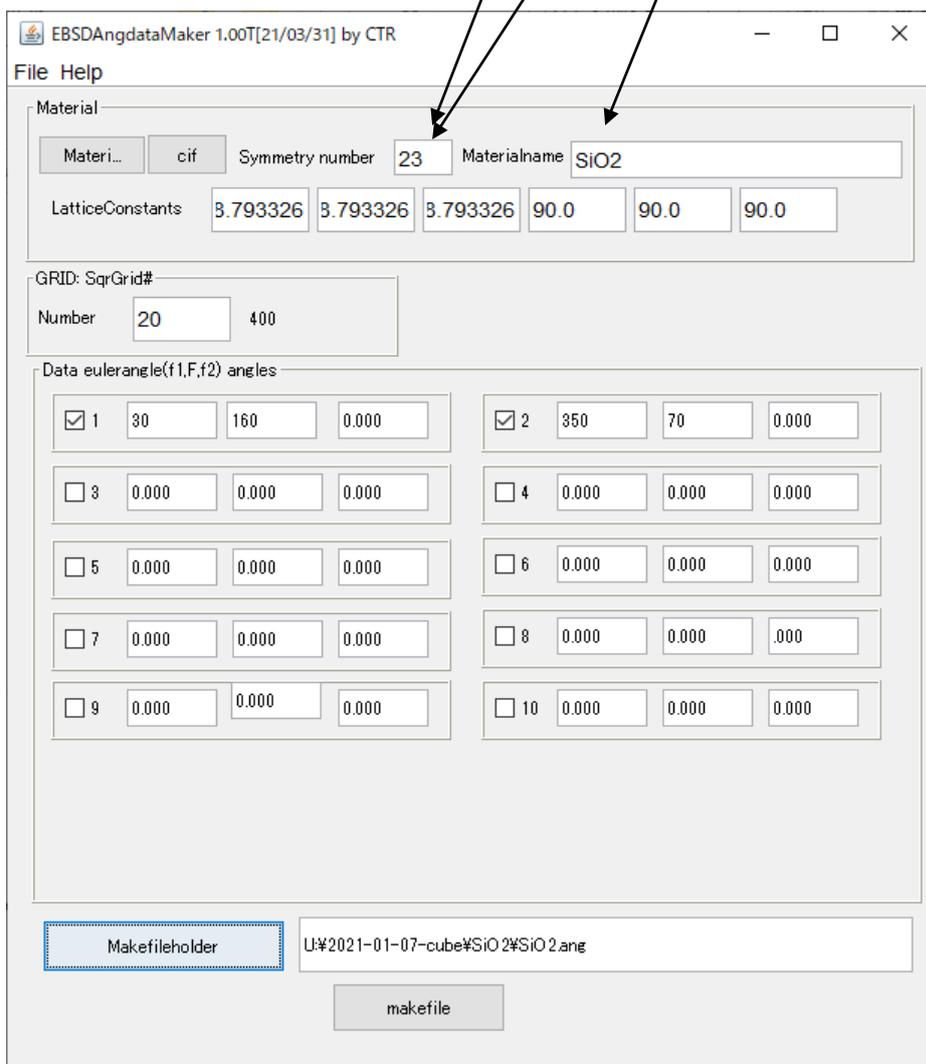
赤丸位置の平滑化は、 $\phi 1$ 方向、 Φ 方向、 $\phi 2$ 方向の6点と赤丸に`weight`を付けて移動加算平均値を`cycle`回繰り返します。



MTEXの広がりを再現するために利用します。1 Cycle毎に1 Step広がります。

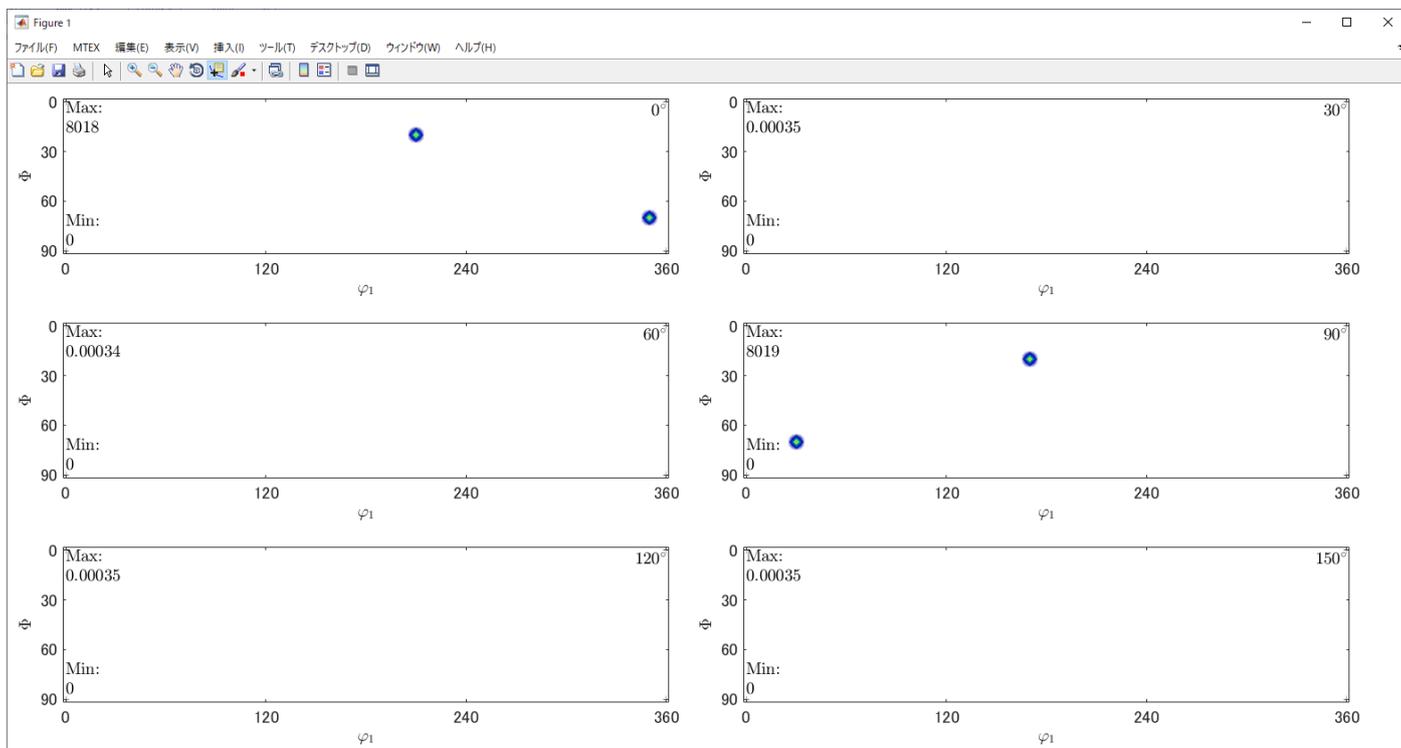
P 2 3 の S i O 2 では

```
data_SiO2↓
_symmetry_space_group_name_H-M P23↓
_cell_length_a 8.79332600↓
_cell_length_b 8.79332600↓
_cell_length_c 8.79332600↓
_cell_angle_alpha 90.00000000↓
_cell_angle_beta 90.00000000↓
_cell_angle_gamma 90.00000000↓
_symmetry_Int_Tables_number 195↓
_chemical_formula_structural SiO2↓
_chemical_formula_sum 'Si12 O24'↓
cell volume 679.92267194↓
```



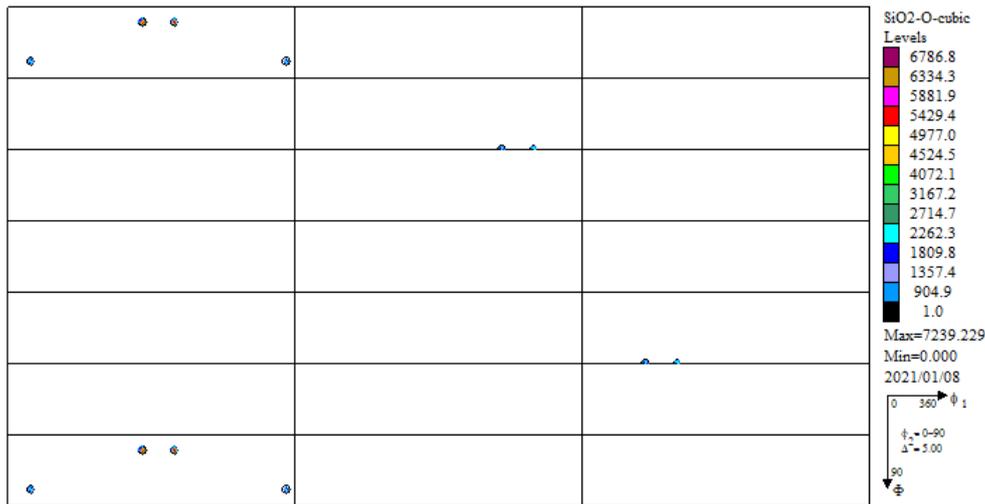
```
TextDisplay 1.14S U:#2021-01-07-cube#SiO2#SiO2.ang
File Help
#
at # Phase 1
1 # MaterialName SiO2
1 # Formula
# Symmetry 23
# LatticeConstants 8.793326 8.793326 8.793326 90.0 90.0 90.0
#
# GRID: SqrGrid#
90 0.524 2.793 0.000 0.000 0.000 1.0 1.0 1 1
ve 6.109 1.222 0.000 1.000 0.000 1.0 1.0 1 1
0.000 0000 0.000 2.000 0.000 1.0 1.0 0 1
```

```
odf = calcDensity(ebsd('SiO2').orientations,'halfwidth',2*degree)
```

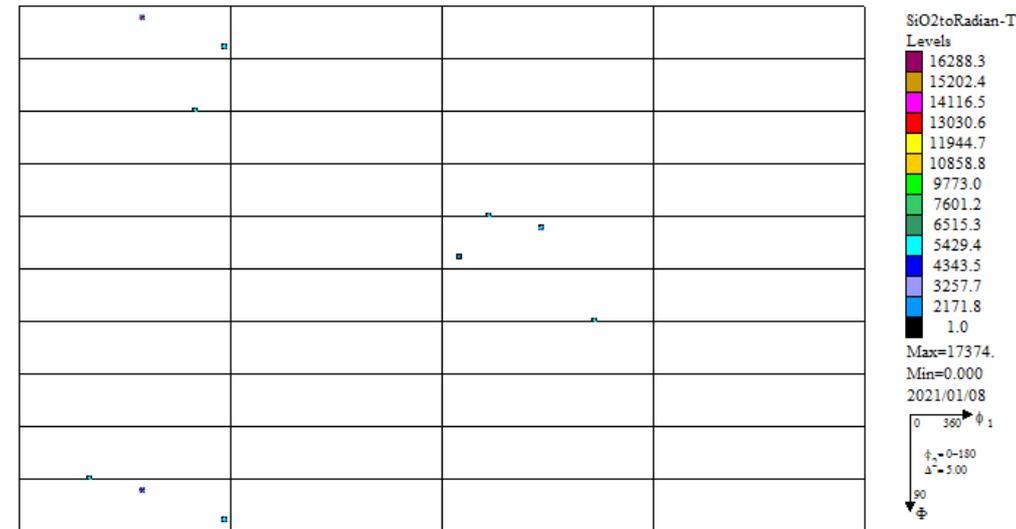


LaboTex

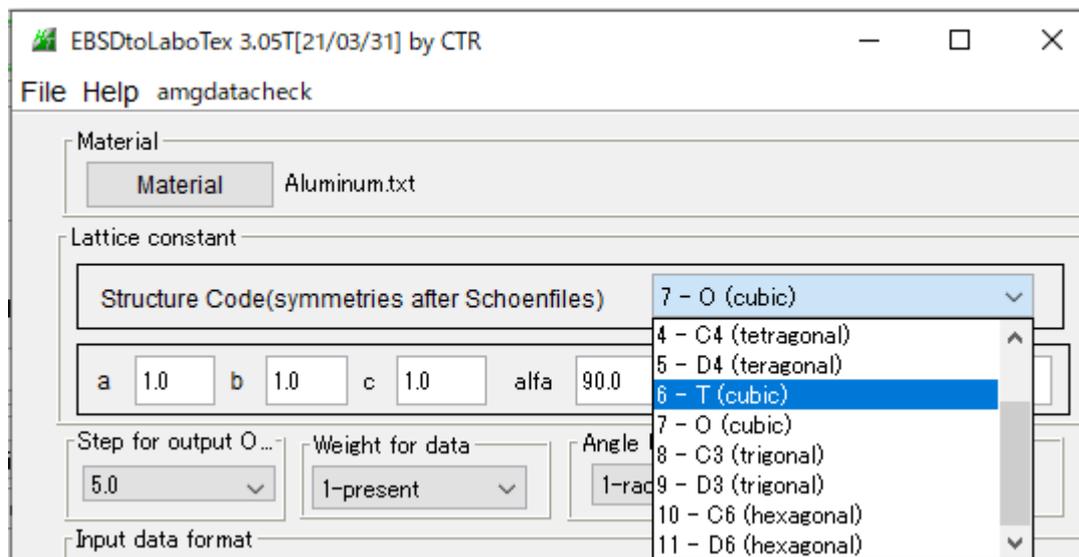
O=Cubic



T-Cubic

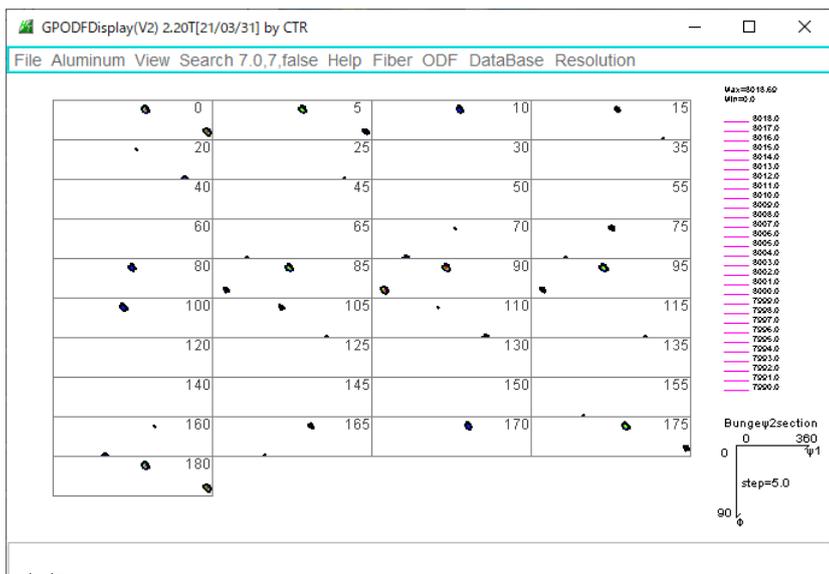


Cubic (P23) はLaboTex T-cubic

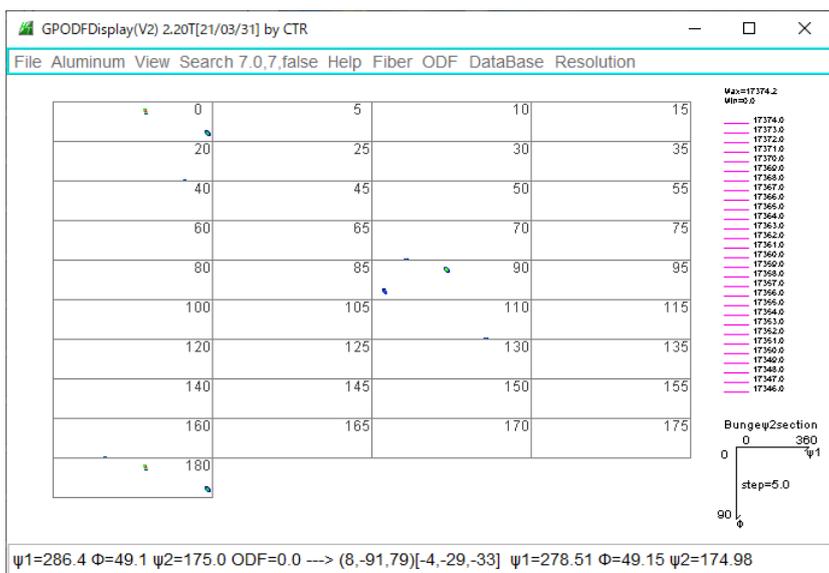


データ比較

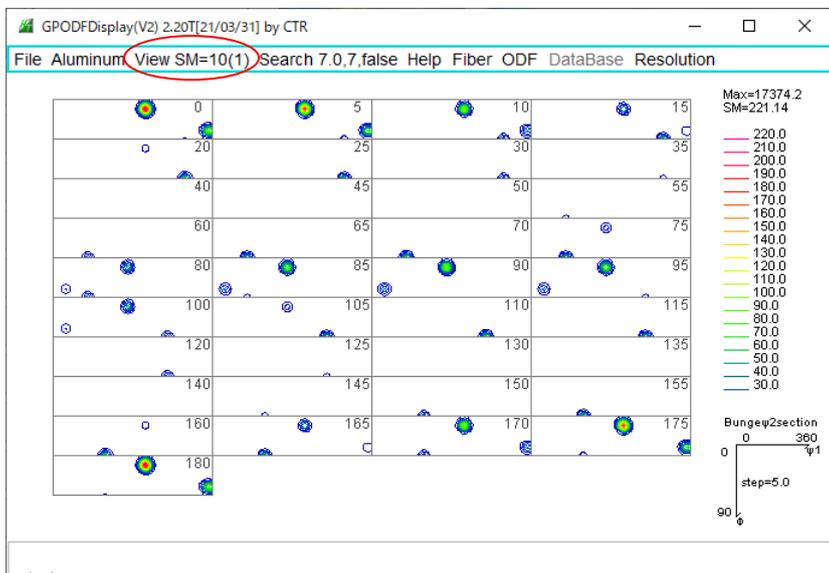
M T E X



L a b o T e x (T-Cubic)



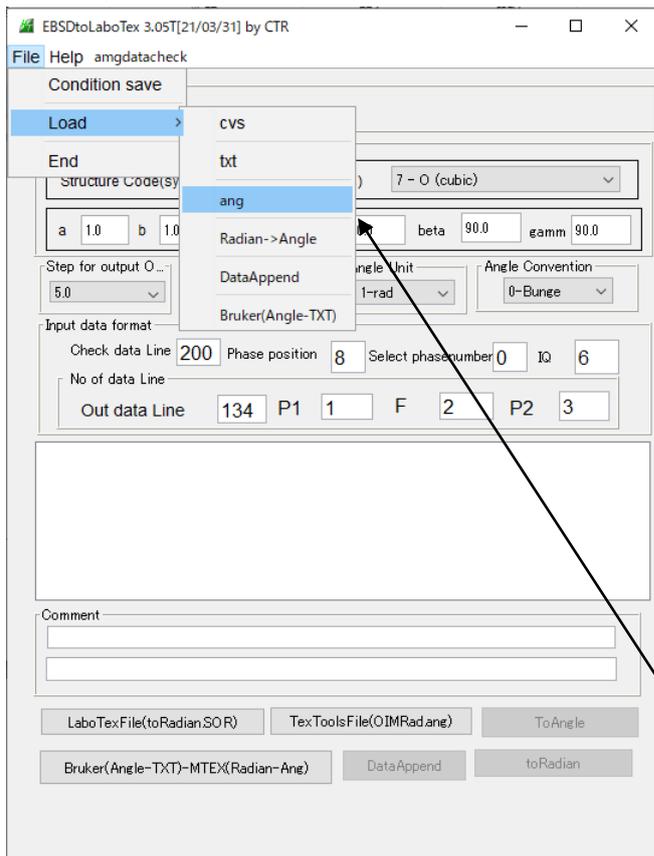
L a b o T e x ODF 図の平滑化



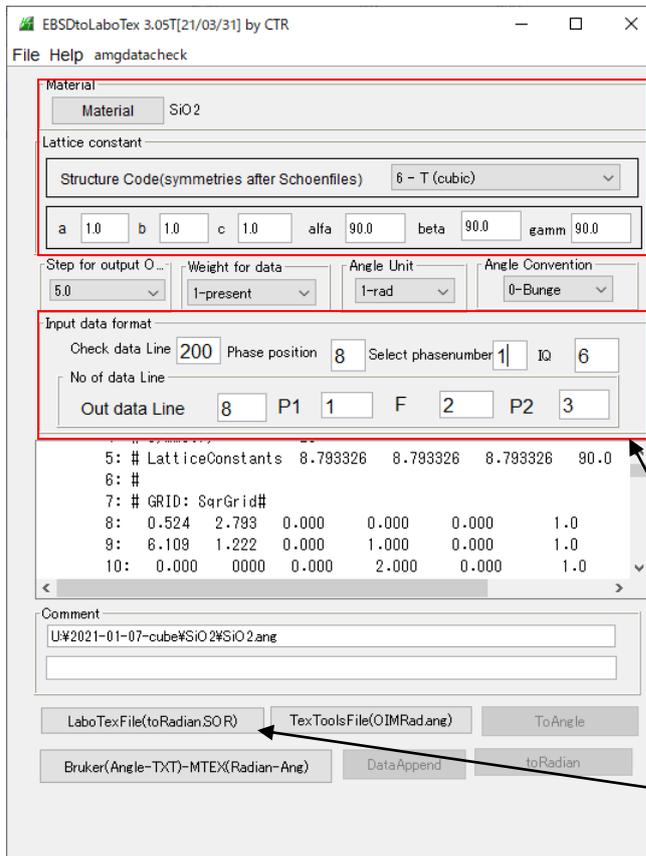
MTEXODF 図は方位の広がりが大きいため、L a b o T e x データを平滑化して方位を広げて比較

LaboTex向けSORファイル

AngデータからSORファイルを作成



Angデータを選択



パラメータを入力してSORを作成

使用したソフトウェア

MATLAB R2007b

MTEX-5.4.0

LaboTex 3.0.50

EBSDAngdataMaker 1.00

EBSDtoLaboTex 3.05

GPODFDisplay 2.20

MTEX動作環境

MTEXODF解析

LaboTexODF解析

Angデータ作成 (MTEX入力データ作成)

LaboTex-SORファイル作成

MTEXとLaboTex比較