

MTEXによる

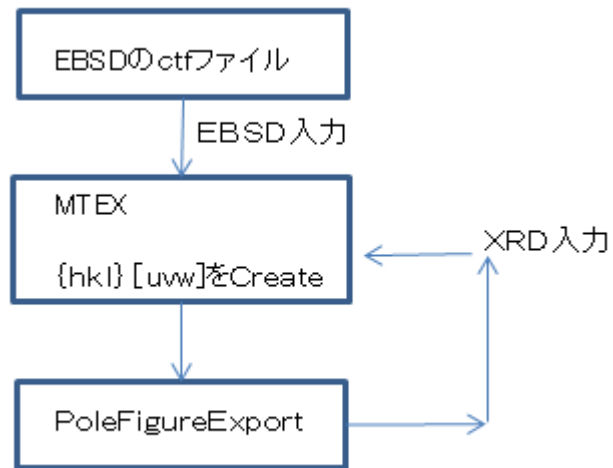
E B S Dの結晶方位をE x p o r t し、X R Dデータとして入力し比較
Q u a r t zはH e x a g o n a l - D 6である。

2020年10月29日

HelperTex Office

概要

MTEXのHexagonalを評価するため、付属データのeclogite.cifからQuartzのパラメータを抽出し、そのパラメータに結晶方位を与え、ODFから極点図を計算し極点図のExportからXRDとして極点図を読み込み、与えた結晶方位と比較してみます。



結果としては一致する。

ODFはB T y p eで一致する。

MT E Xによるパラメータ作成

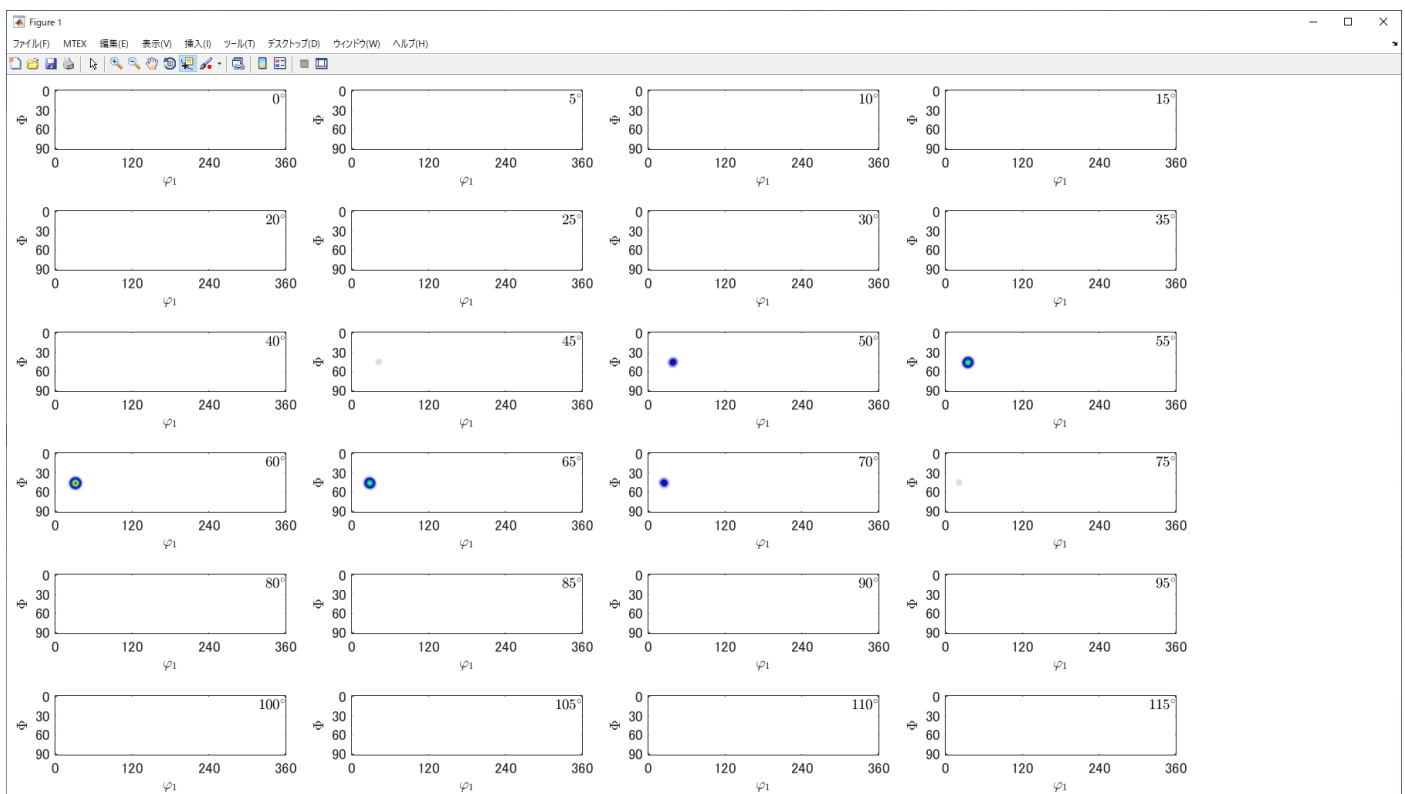
```
CS = {...  
  'notIndexed',...  
  crystalSymmetry('mmm', [18 8.9 5.2], 'mineral', 'Orthopyroxene', 'color', [0.53 0.81 0.98]),...  
  crystalSymmetry('12/m1', [9.8 8.9 5.3], [90,105.9,90]*degree, 'X||a*', 'Y||b', 'Z||c', 'mineral', 'Clinopyroxene', 'color', [0.56 0.74 0.56]),...  
  crystalSymmetry('-1', [8.2 13 14], [93.38,115.87,90.82]*degree, 'X||a*', 'Z||c', 'mineral', 'Bytownite', 'color', [0.85 0.65 0.13]),...  
  crystalSymmetry('m-3m', [11 11 11], 'mineral', 'Garnet - (Mg,Ni)3Al2', 'color', [0.94 0.5 0.5]),...  
  crystalSymmetry('12/m1', [9.5 8.7 5.2], [90,106.9,90]*degree, 'X||a*', 'Y||b', 'Z||c', 'mineral', 'Omphacite', 'color', [0 0 0.55]),...  
  crystalSymmetry('12/m1', [7.1 12 7.2], [90,120.34,90]*degree, 'X||a*', 'Y||b', 'Z||c', 'mineral', 'Coesite', 'color', [0 0.39 0]),...  
  crystalSymmetry('-3m1', [4.9 4.9 5.5], 'X||a*', 'Y||b', 'Z||c', 'mineral', 'Quartz-new', 'color', [0.55 0 0]);
```

Quartz の抽出

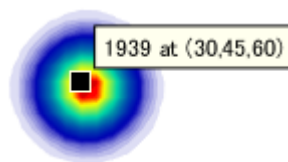
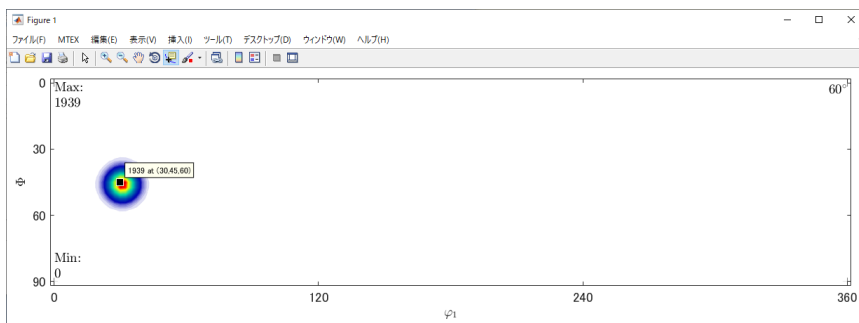
```
ans=ebds('Quartz-new')  
cs=ebds('Quartz-new').CS
```

結晶方位作成

```
ori = orientation.byMiller([6 6 13],[5 -31 12],cs)  
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)  
odf= unimodalODF(ori,psi)  
plot(odf,'sections',24)
```



Plot(odf, 'phi2', 45*degree)

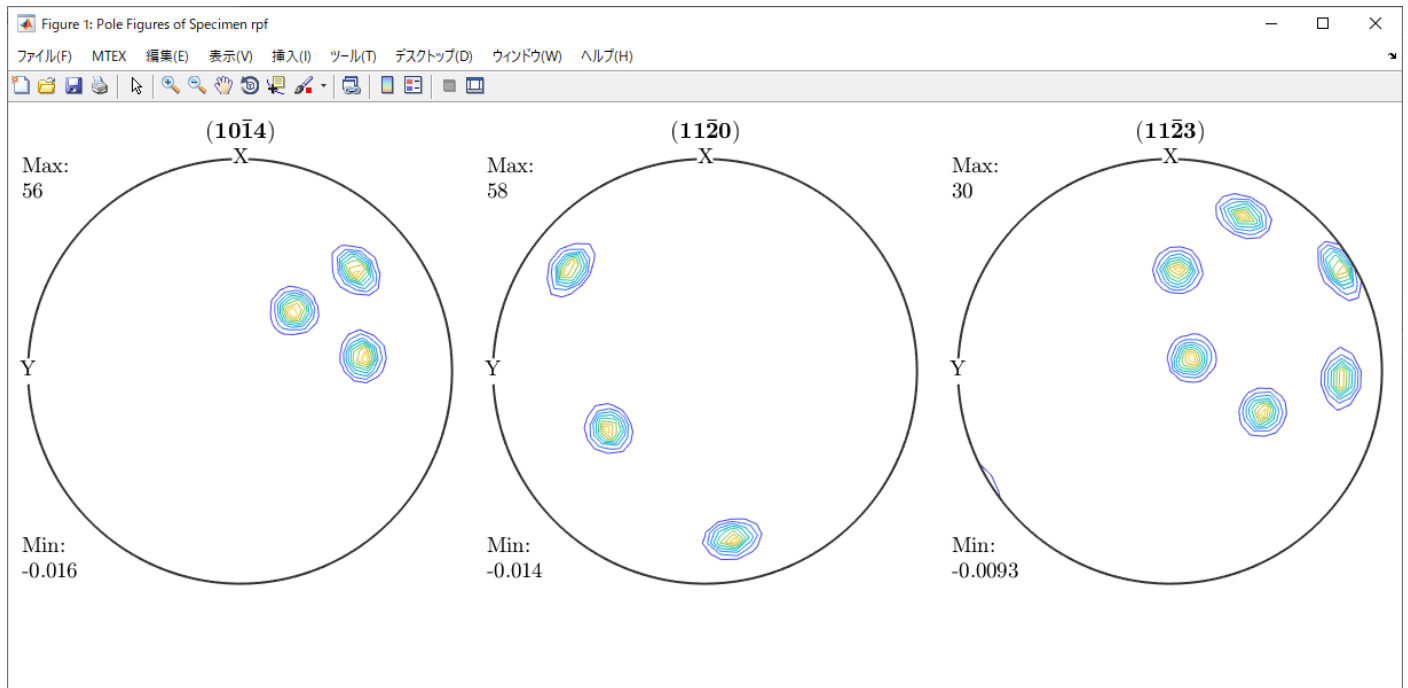


極点図作成

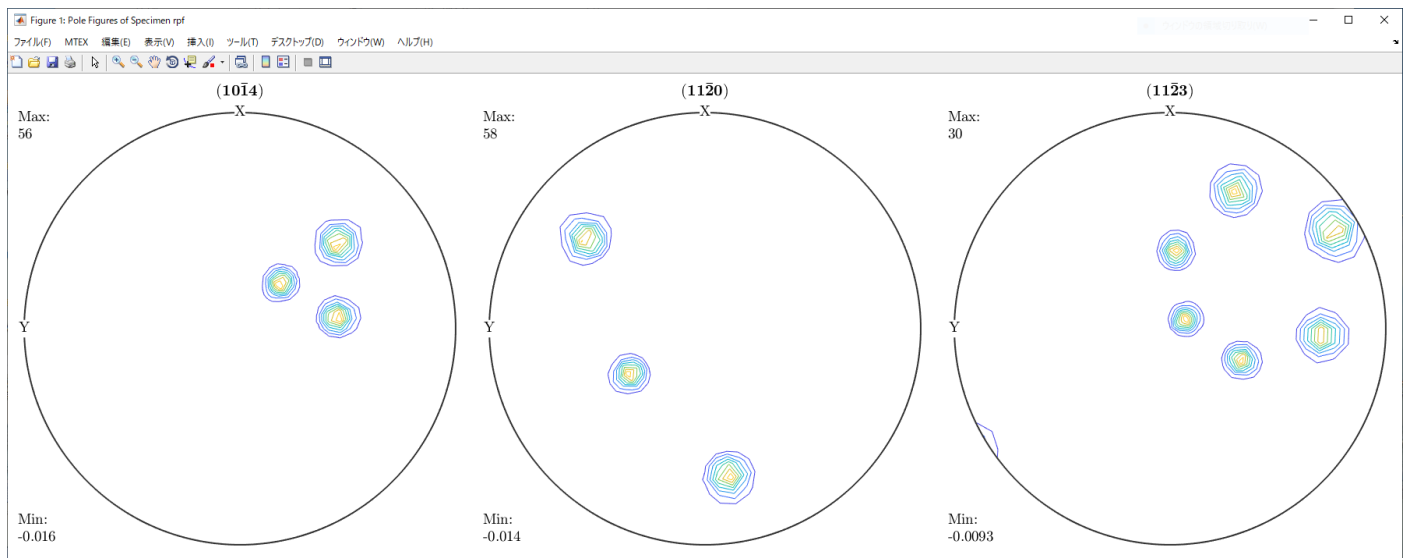
```
h = [Miller(1,0,4,cs),Miller(1,1,0,cs),Miller(1,1,3,cs)]
```

```
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

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

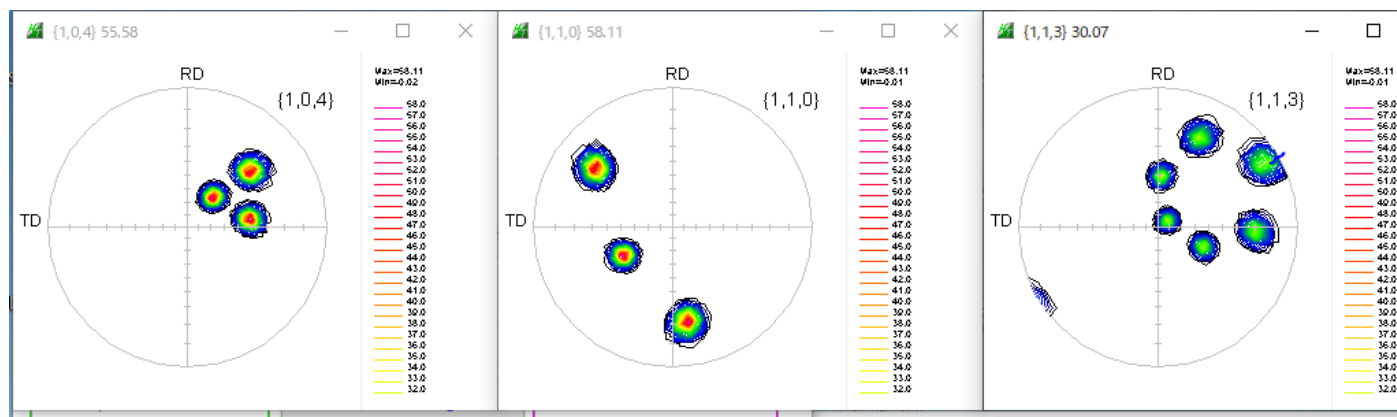


```
plot(rpf,'contour','projection','stereo')
```



Rpf を Export し X R D で読み込む

Exportした極点図



XRDとしてMTExに読み込む

Import Wizard

Crystal Reference Frame

Crystal Symmetry

Mineral

☒ Indexed ☐ Not Indexed

mineral name:

plotting color:

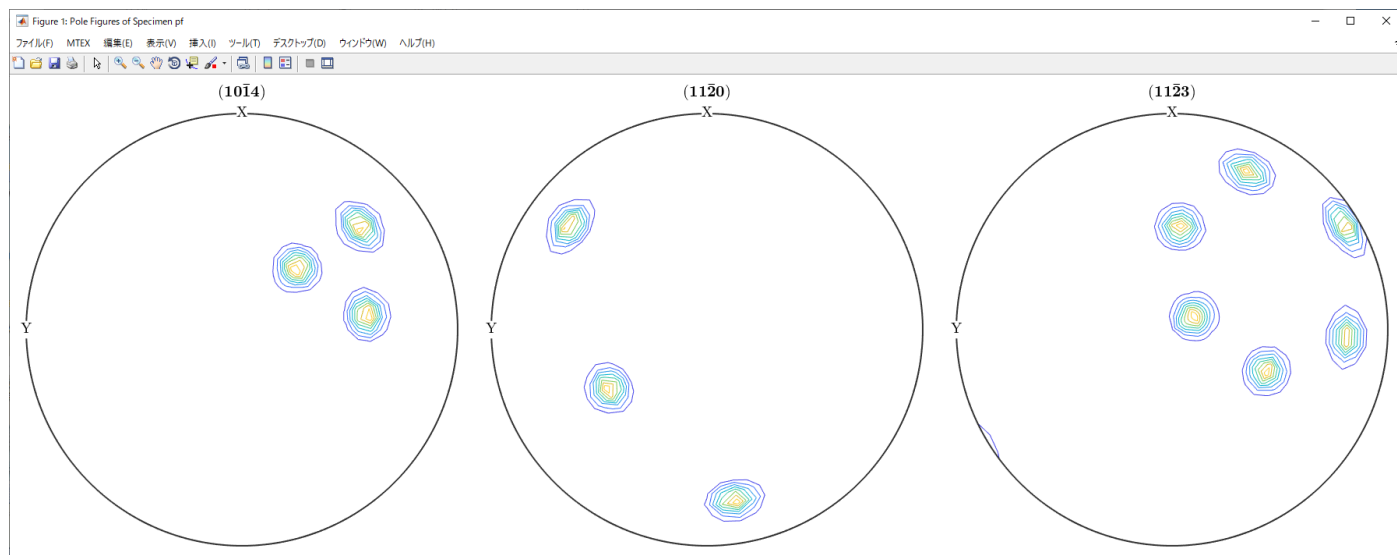
Crystal Coordinate System

Point Group:

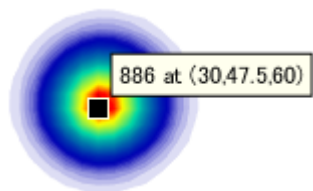
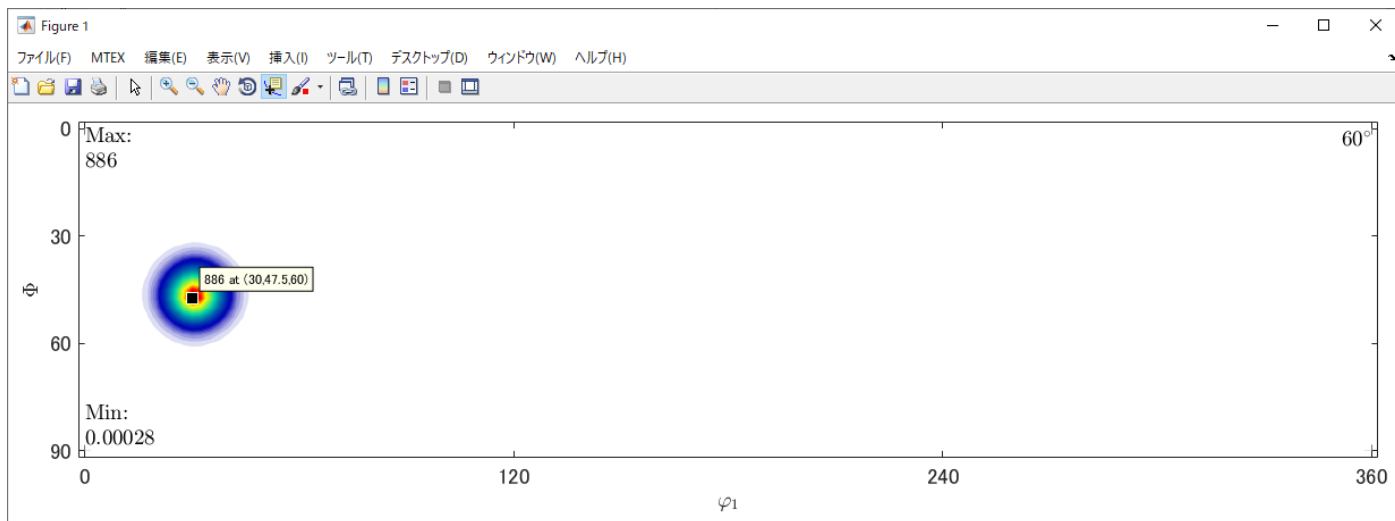
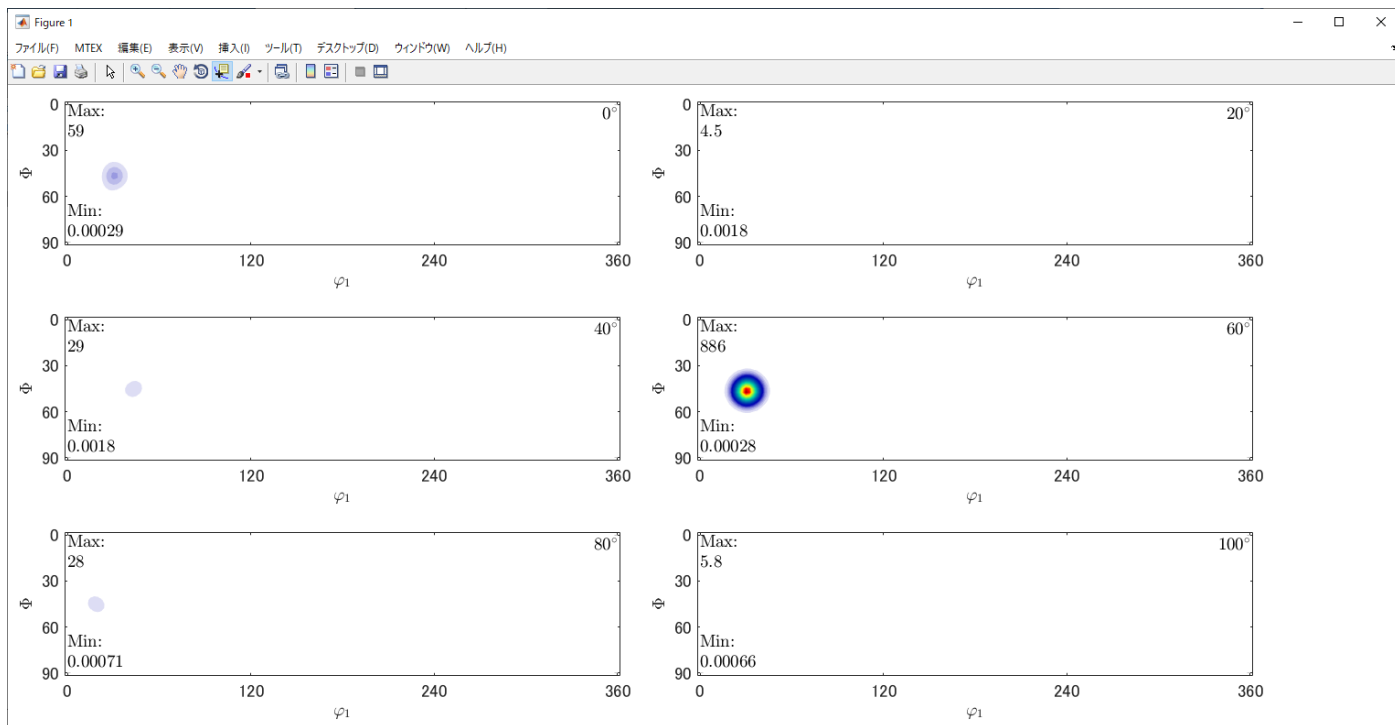
Axis Length: a b c

Axis Angle: alpha beta gamma

読み込まれた極点図



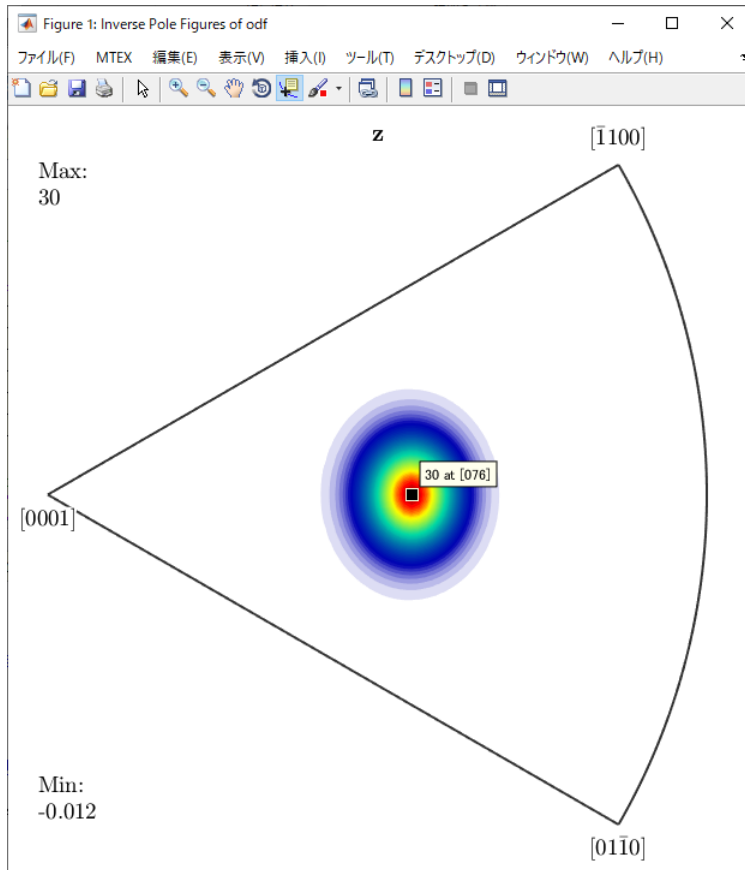
ODF 図



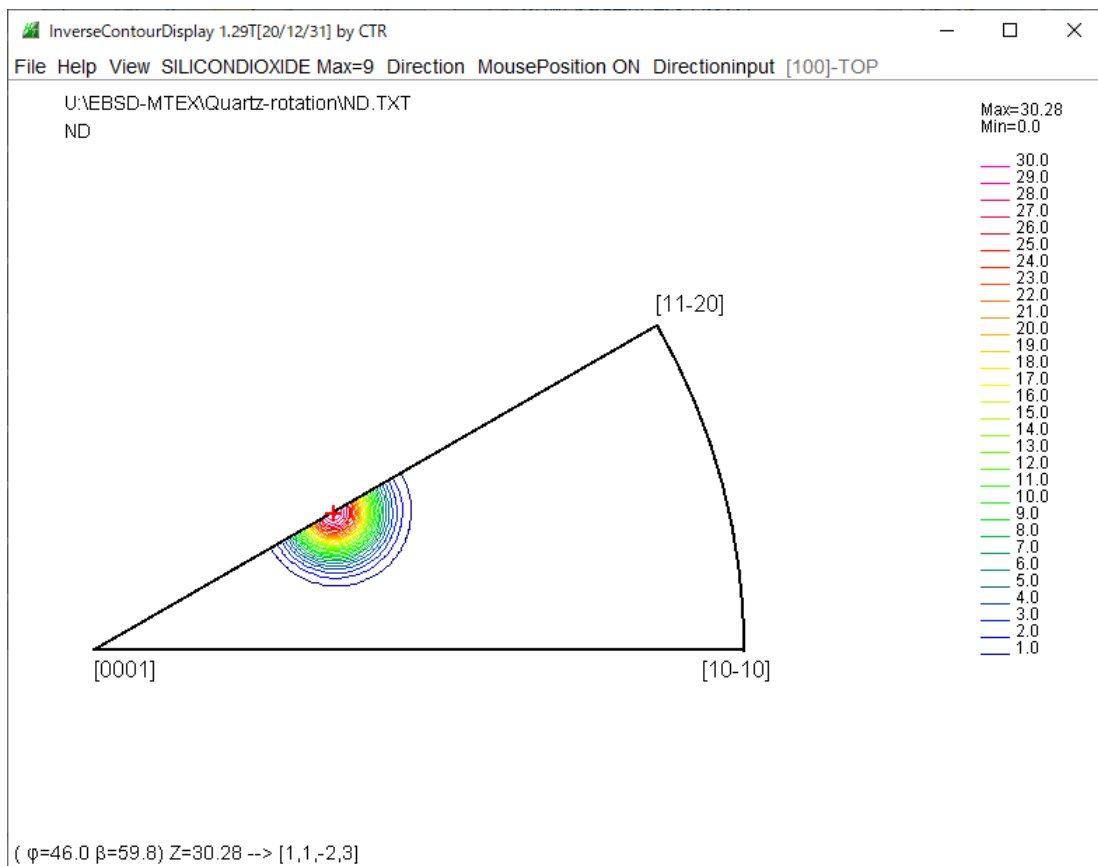
ほぼ一致している

逆極点図

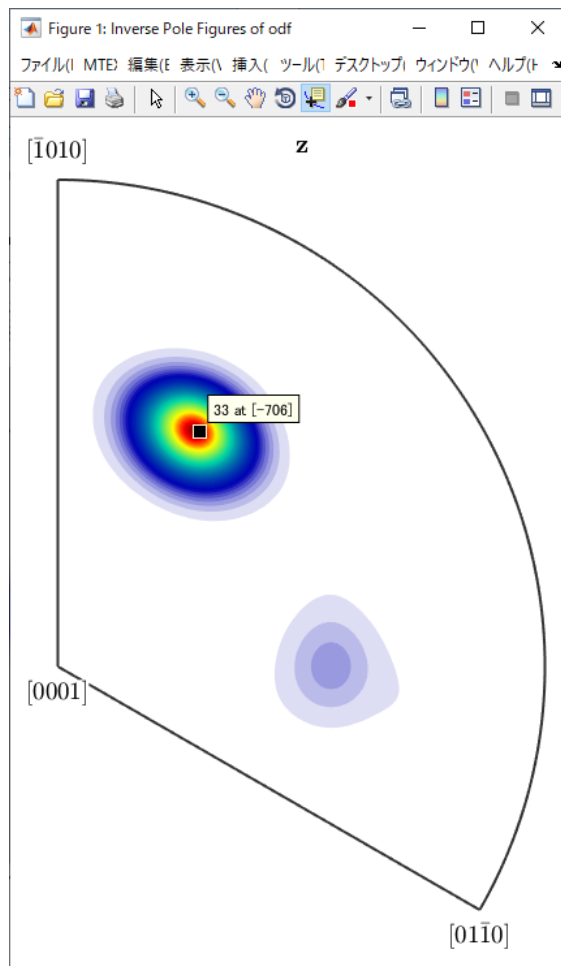
E B S D の逆極点図



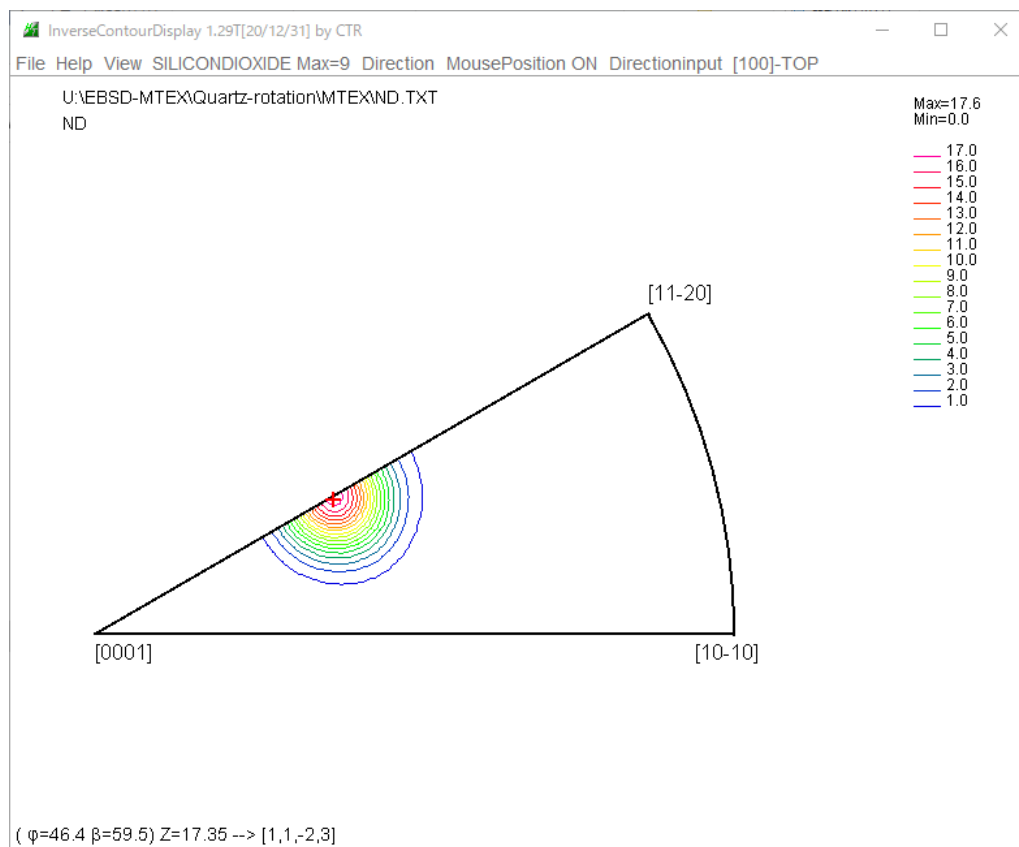
上下を平均化



XRD から入力し、MTEX 計算した逆極点図



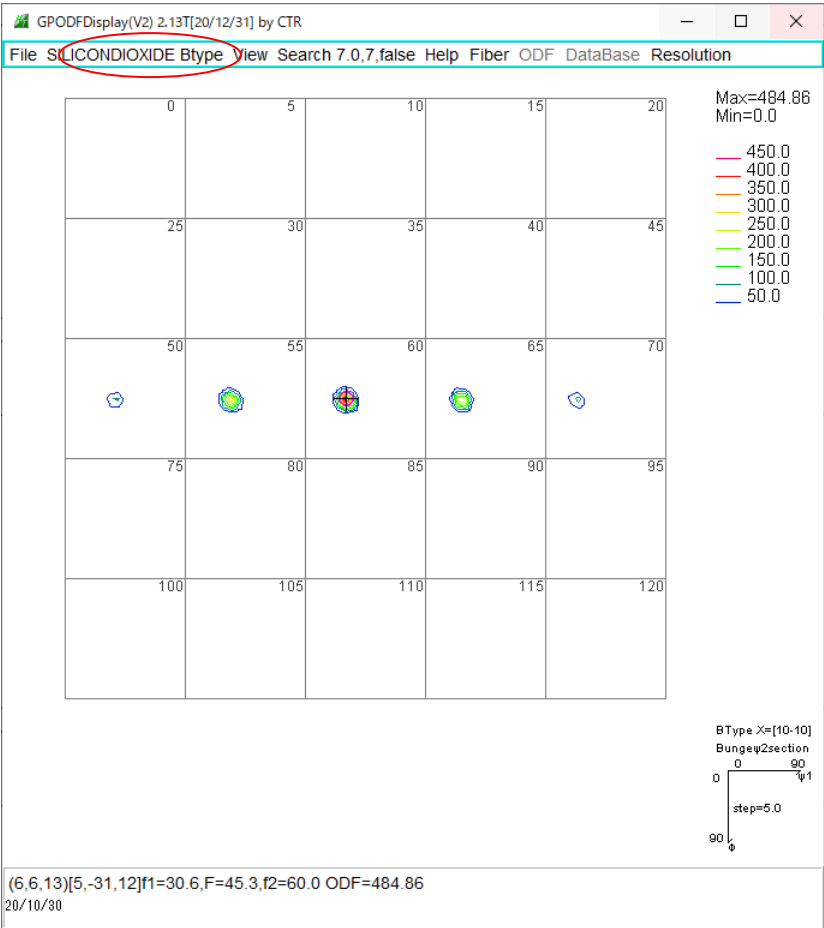
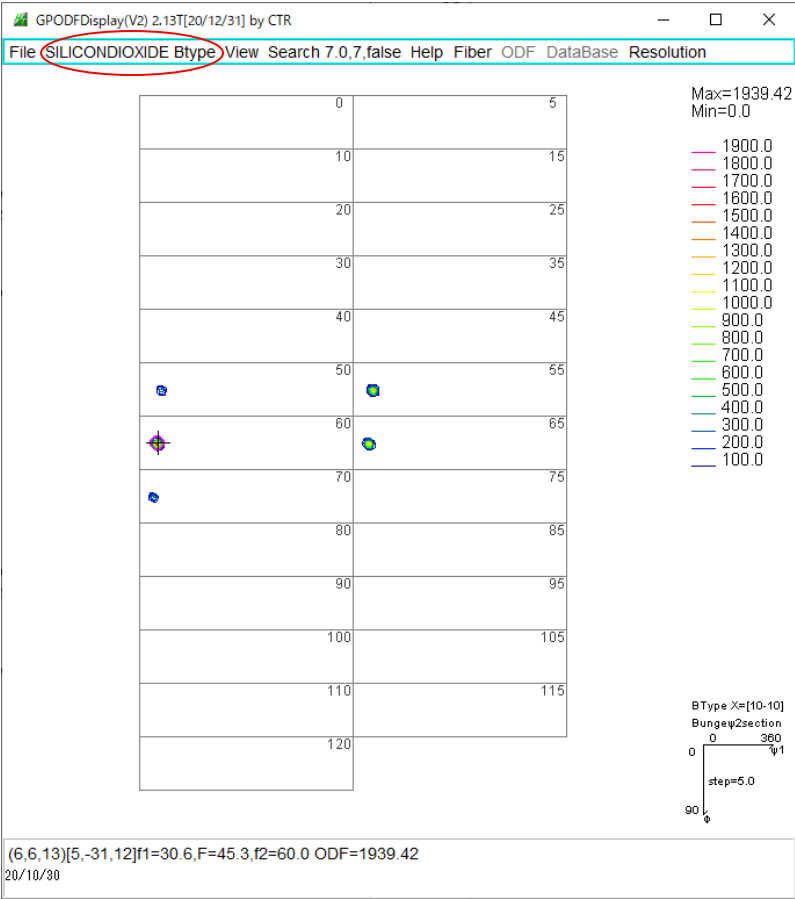
4 分割の平均化



一致している。

ExportしたODF（EBSD）BTypeでFitする。

MTEX(f1 F f2 Value)	>	(Hexa BType) or Other
MTEX(Triclinic(1/4cut) to Orthorhombic)	>	Hexa AType(EBSDExport)



XRD極点図をMTEXで計算

MTEX(f1 F f2 Value)

MTEX(Triclinic(1/4cut) to Orthorhombic)

>

(Hexa BType) or Other

Hexa AType(EBSDEExport)

