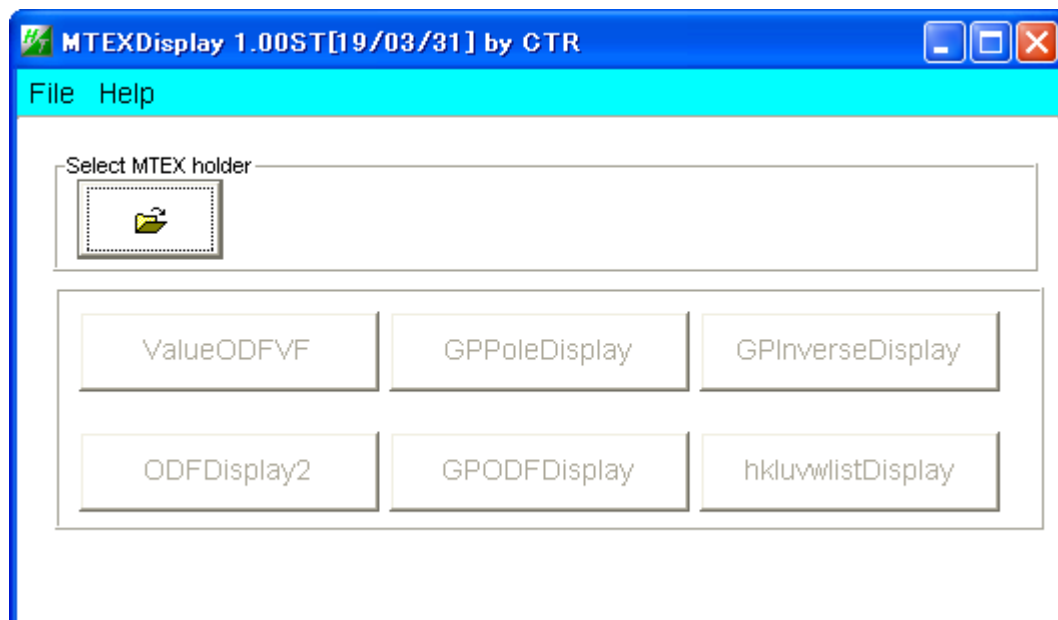


MTEXの結果を表示解析する

MTEXDisplayソフトウェア

Ver1.00



2018年07月28日

HelperTex Office

概要

MTEXは、MATLAB環境下で使えるFreeのODF解析ソフトウェアである。
CTRソフトウェアでは、MTEXの解析結果のODF図、再計算極点図、逆極点図をファイル渡して解析出来ませんが、各ソフトウェアが各種カテゴリに散らばっていて操作が煩雑であった。

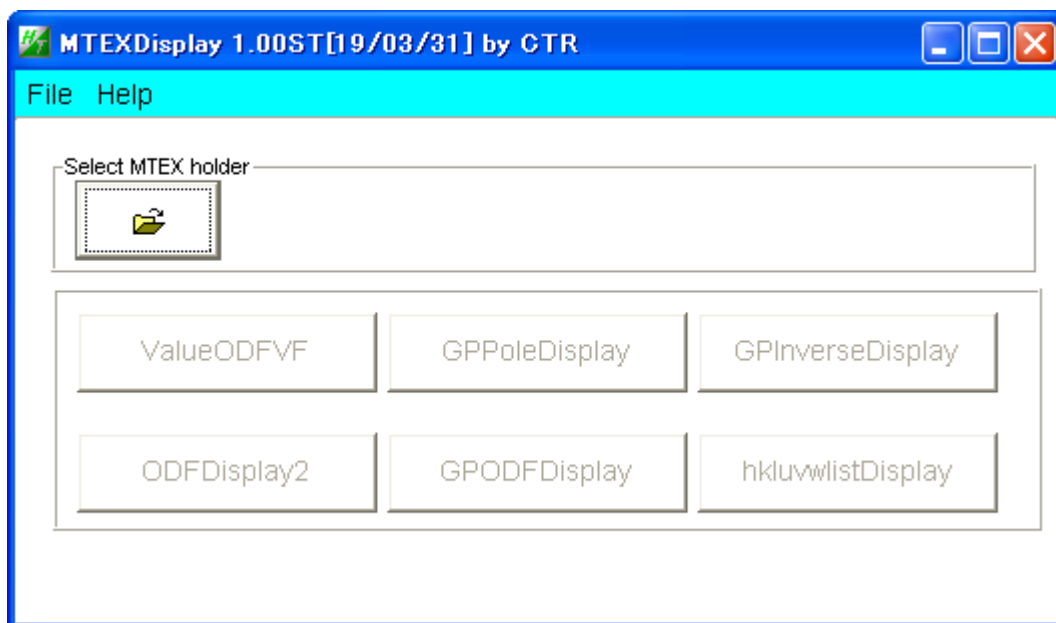
解析結果のError評価に、ValueODFVF

極点図描画は、MakePoleFileを介してGPPoleDisplay

逆極点図の描画解析に、GPInverseDisplay

ODF図の解析に、ODFDisplay2, GPODFDisplay

この複数のソフトウェアを1つのソフトウェアから起動出来る様にしました。



MTEXホルダの指定から始まります。

説明書は、全てのソフトウェアで、

Help->Manual->Manualで参照出来ます。

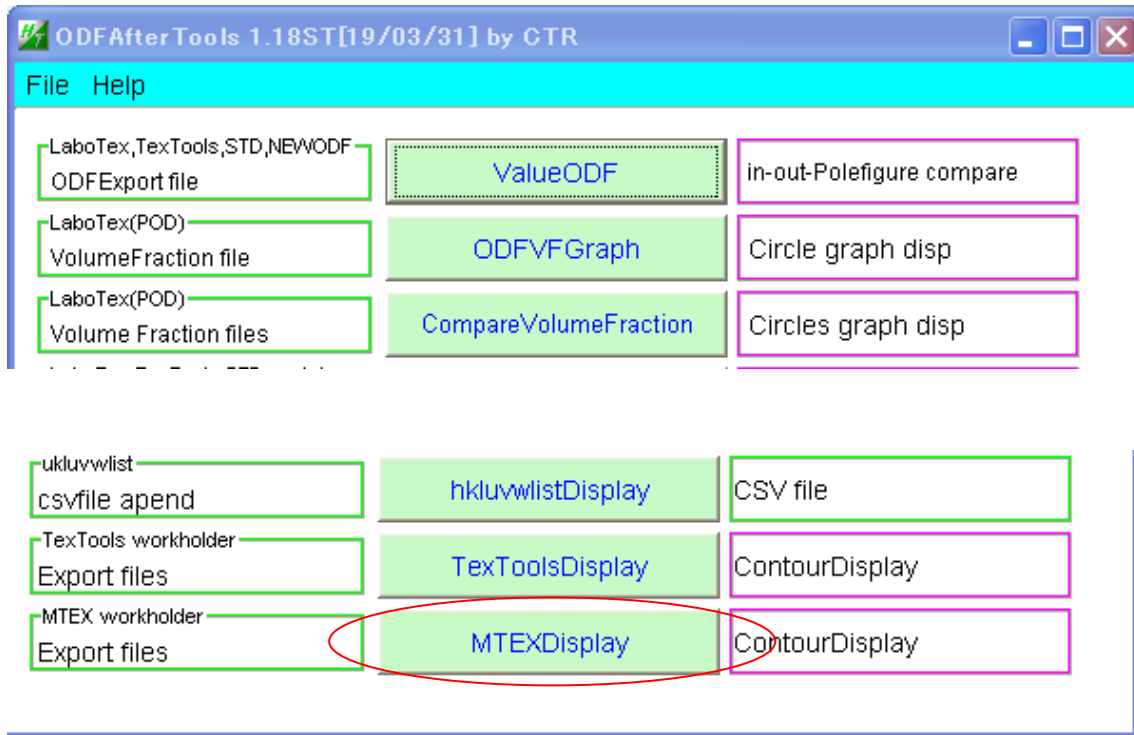
各社極点図

ODFPoleFigure2 3.79SKT[19/03/31] by CTR	
InitSet	BGMode Measure(Calc) Condition Free OverlapRevision MinimumMode R
Rigaku PoleFigure	
Bruker PoleFigure	
PANa PoleFigure	

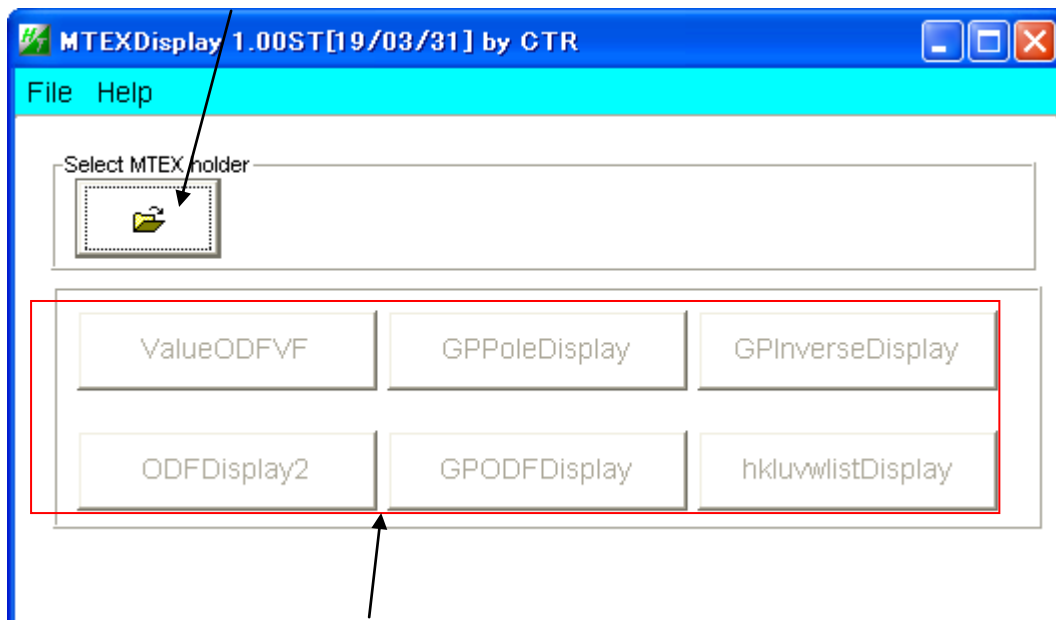
ソフトウェアの起動法

C:\¥CTR¥bin¥MTEXDisplay.jar を直接

ODFPoleFigure2(ODFPoleFigure1.5)->TooKit->ODFAfter->MTEXDisplay



MTEX のホルダを選択



各種解析を選択する。

実施例

DATA: CTR¥DATA¥Aluminum-H-O¥Aluminum-H

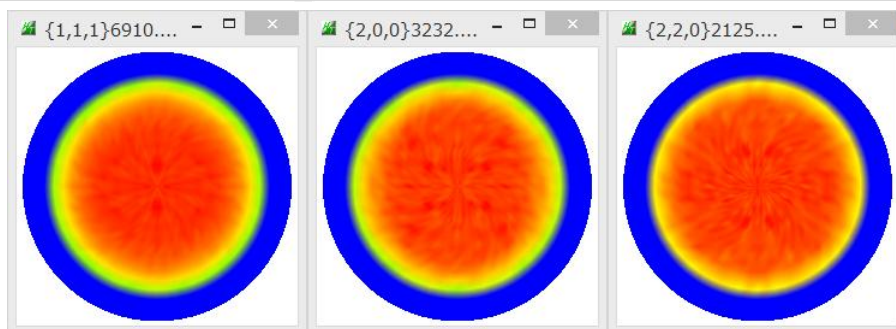
Random: CTR¥DATA¥Aluminum-H-O¥Al_random

Random ファイル TABLE を作成

Background 削除

The screenshot shows the ODFPoleFigure2 software interface. At the top, three windows display diffraction patterns for hkl values {1,1,1}7363.2, {2,0,0}3692.4, and {2,2,0}2452.8. The main window is titled 'Aluminum-H-O'. The control panel includes:

- Files select: ASC(RINT-PC), 111.ASC 200.ASC 220.ASC
- Calculation Condition: C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Al_random\111.ASC
- Background delete mode: DoubleMode, SingleMode, LowMode, HighMode, Nothing. BG defocus: SmartLab-DSH2mm-Schulz. Trans blinds angle: 30.0.
- Peak slit: 7.0 mm, BG Slit: 7.0 mm, PeakSlit / BGS..., BG Scope: 80.0 deg, 90.0 deg.
- AbsCalc: Ref, Trans, Schulz reflection method, Absorption coefficient: 133.0 1/cm, Thickness: 0.2 cm, 2Theta: 38.58 deg, 1/Kt.
- Defocus file Select Transmission defocus HKL+T: Defocus(1) functions file, Defocus(3) function files folder, Defocus(2) function files folder.
- Smoothing for ADC: Cycles 2, Weight 10, After connection.
- Normalization: CTR, Connect, Average, OutFiles: Asc, MTextAsc, Ras, TXT, TXT2.
- Buttons: Cancel, Calc (circled in red), Connect, Exit&ODF, ODF, ValueODFVF..., ValueODFVF-A.



データの登録

The screenshot shows the 'Defocus file Select Transmission defocus HKL+T' dialog box. The 'Defocus(1) functions file' option is selected, and the file path is set to C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Al_random\defocus\DEFOCUS_NOTNORM_F.TXT. The 'Files' button is highlighted. On the right, a file explorer window shows the 'Al_random' folder containing files 111_chFB03_2.TXT, 200_chFB03_2.TXT, and 220_chFB03_2.TXT.

ODFPoleFigure2 ファイルより極点処理

解析を行う極点図を複数選択

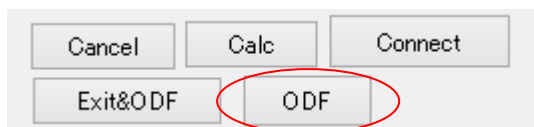
The screenshot shows the ODFPoleFigure2 software interface. At the top, three pole figure windows are open, displaying intensity maps for different reflections: $\{1,1,1\}$, $\{2,0,0\}$, and $\{2,2,0\}$. The main window displays the 'Calculation Condition' panel with various settings. A dialog box titled 'Dialog' is open, displaying the message 'The Rp% is calculated.' An arrow points from the dialog box to the 'Search minimum Equal Angle Rp%(Cubic only)' checkbox in the 'Defocus' section of the main window.

Rp%の最小化を指定して、計算

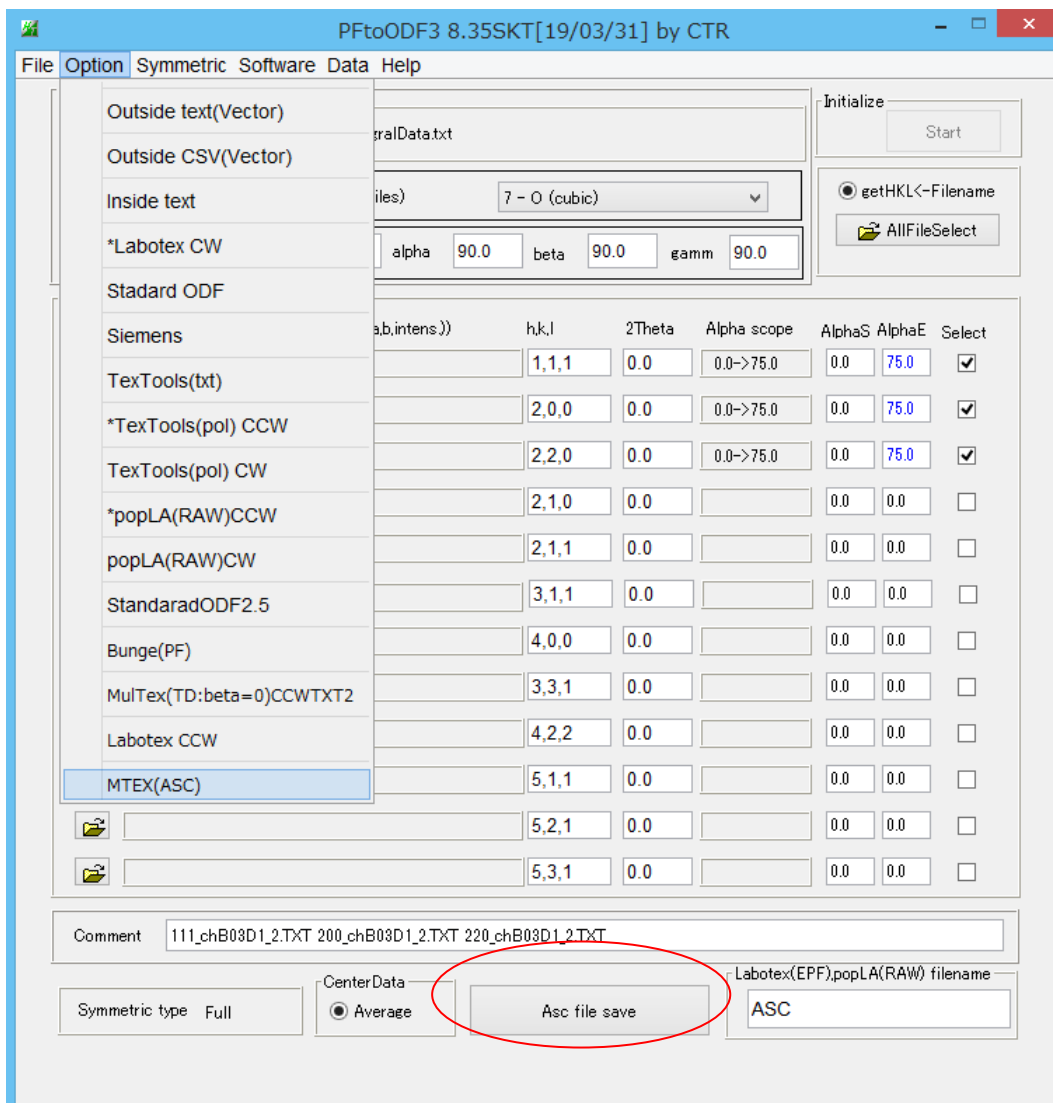
The screenshot shows the ODFPoleFigure2 software interface after calculation. The three pole figure windows now display the calculated Rp% values: $\{1,1,1\}$ 4.75, $\{2,0,0\}$ 2.89, and $\{2,2,0\}$ 5.48. The 'Search minimum Equal Angle Rp%(Cubic only)' checkbox is checked. The status bar at the bottom displays the search results: 'Search Rp% (1,1,1) 2.86% -> 2.86% (2,0,0) 2.1% -> 2.1% (2,2,0) 3.46% -> 3.46% Filemake success!!'

最適化を行ったが、同一の値

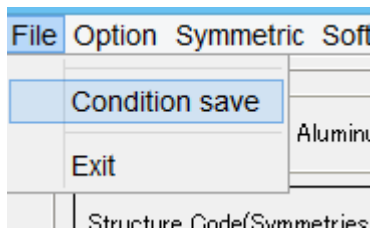
MTEXの入力ファイルを作成



Material で Aluminum を選択



MTEX を選択、常に MTEX を用いる場合、Condition save しておく



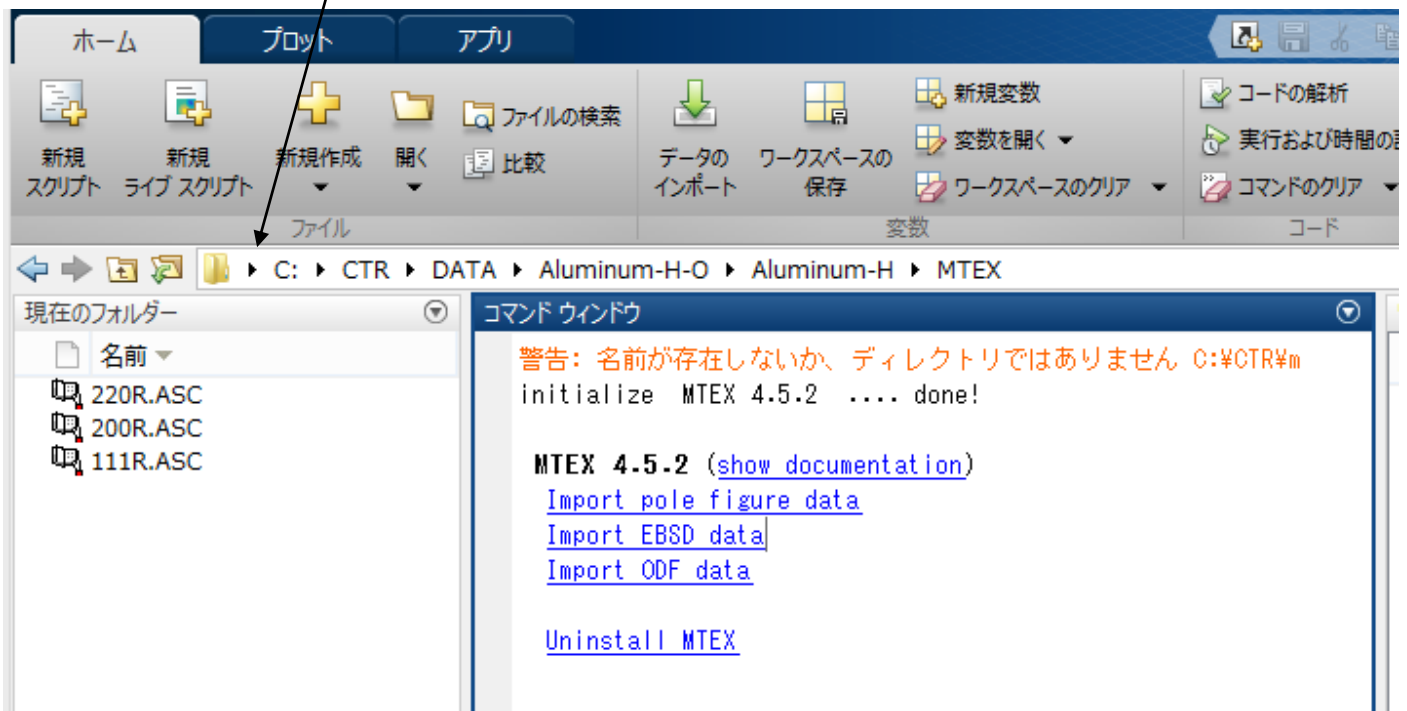
ファイルは、入力ホルダの MTEX ホルダに作成されます。

CTR > DATA > Aluminum-H-O > Aluminum-H > MTEX				
	名前	更新日時	種類	サイズ
	111R.ASC	2018/07/24 18:22	RINT20007キ-	17 KB
	200R.ASC	2018/07/24 18:22	RINT20007キ-	17 KB
	220R.ASC	2018/07/24 18:22	RINT20007キ-	17 KB

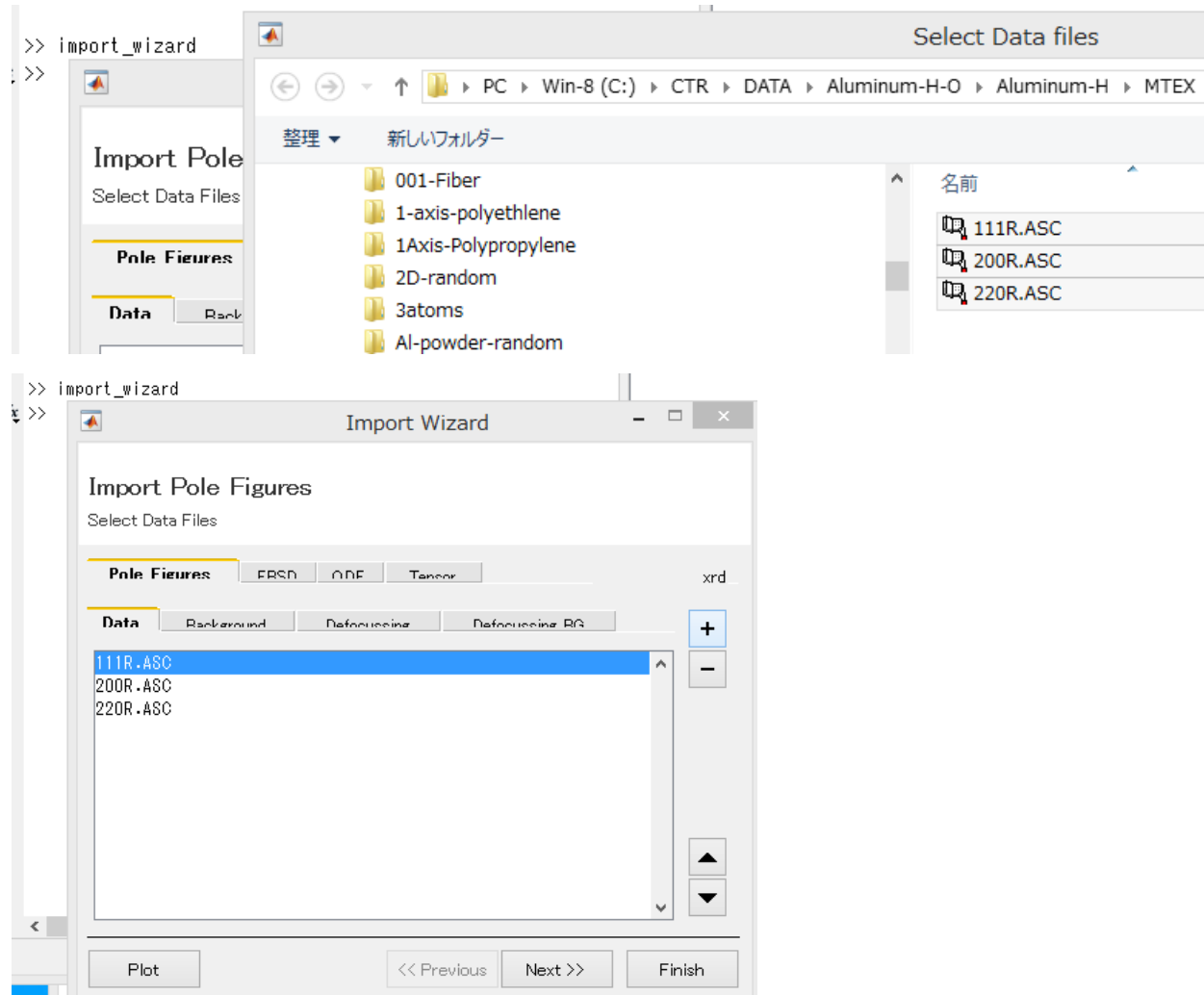
MTEX解析

MATLAB から MTEX 解析

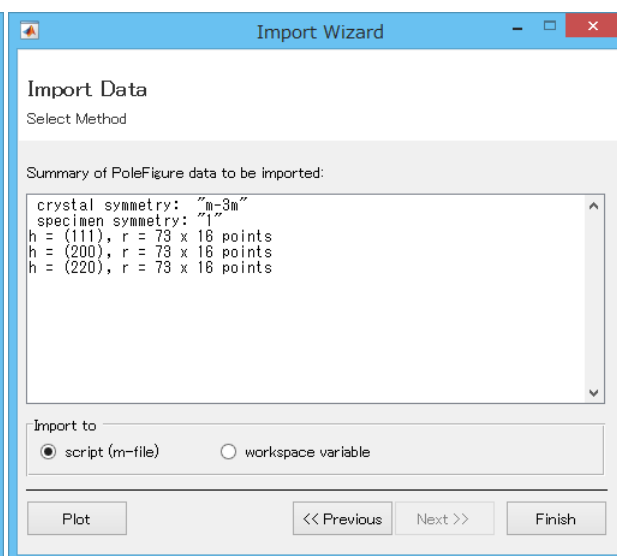
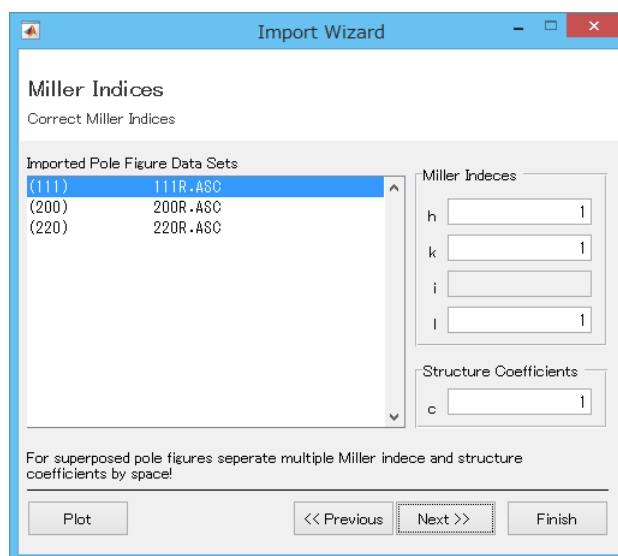
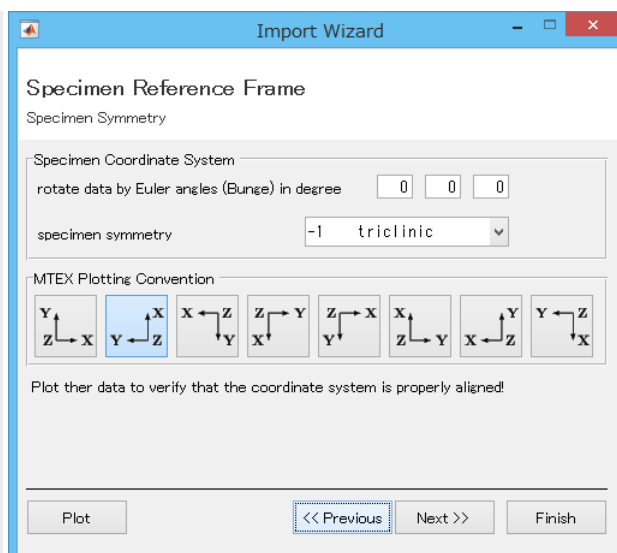
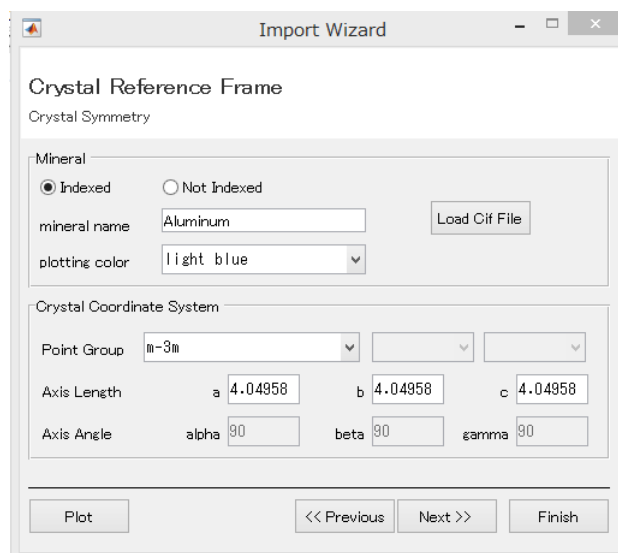
フォルダを指定する



データ入力



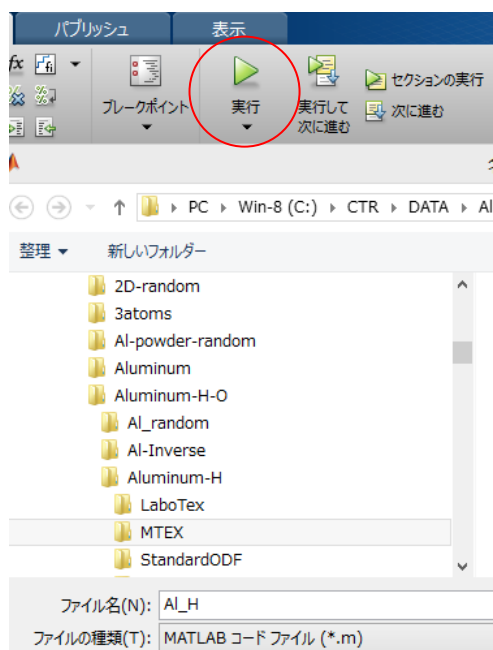
アルミニウムを指定



1 / 4 対称で実行

```
% specimen symmetry
```

```
SS = specimenSymmetry('1'); -> SS = specimenSymmetry('orthorhombic');
```



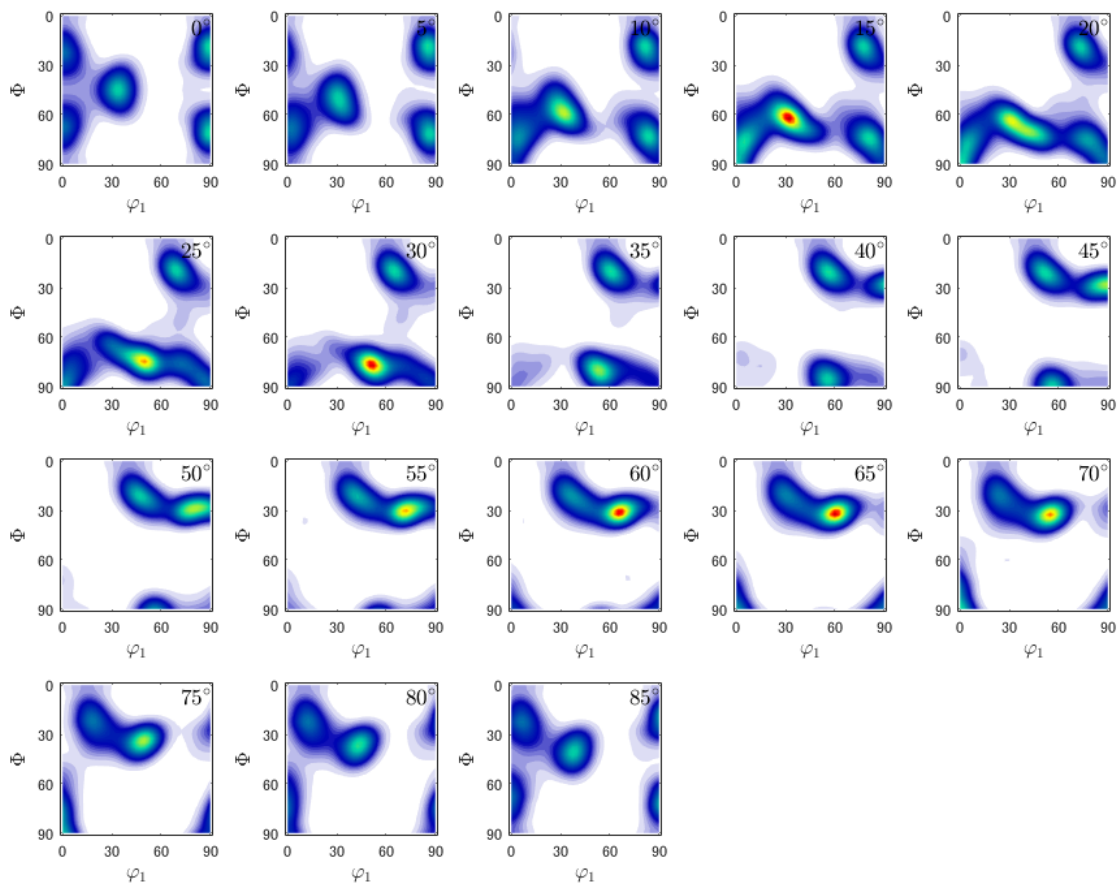
名前	値
CS	24x2 crystalSymmetry
fname	1x3 cell
h	1x3 cell
pf	73x48 PoleFigure
pname	'C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-H\MTEX'
SS	1x1 specimenSymmetry

pf から ODF 計算

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

ODF 図を描画

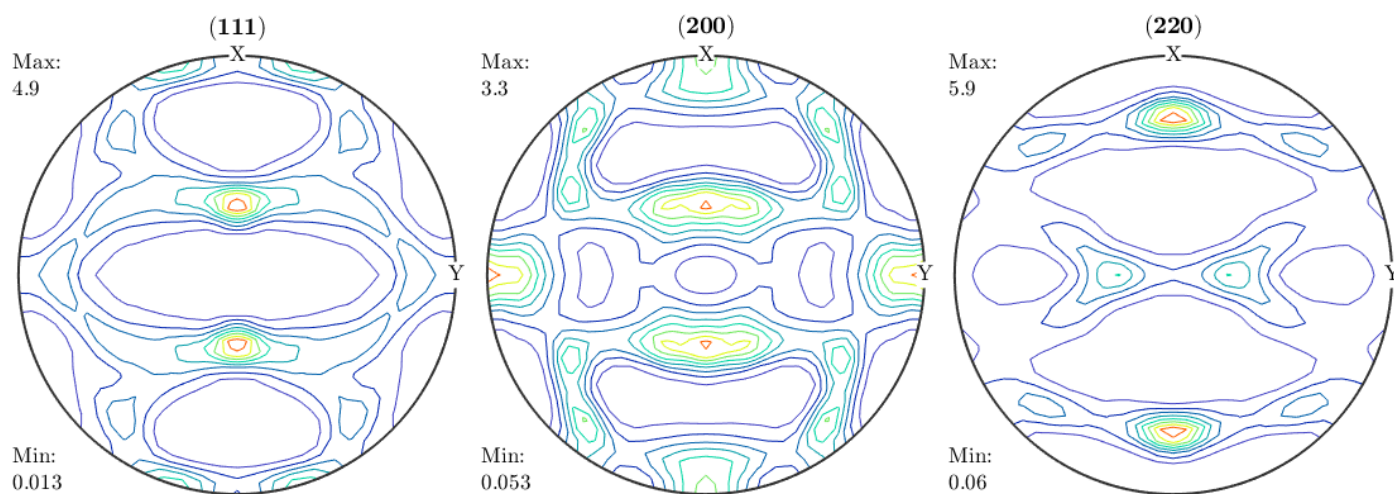
```
>> plot(odf,'Sections',18)
```



ODF から再計算極点図作成

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

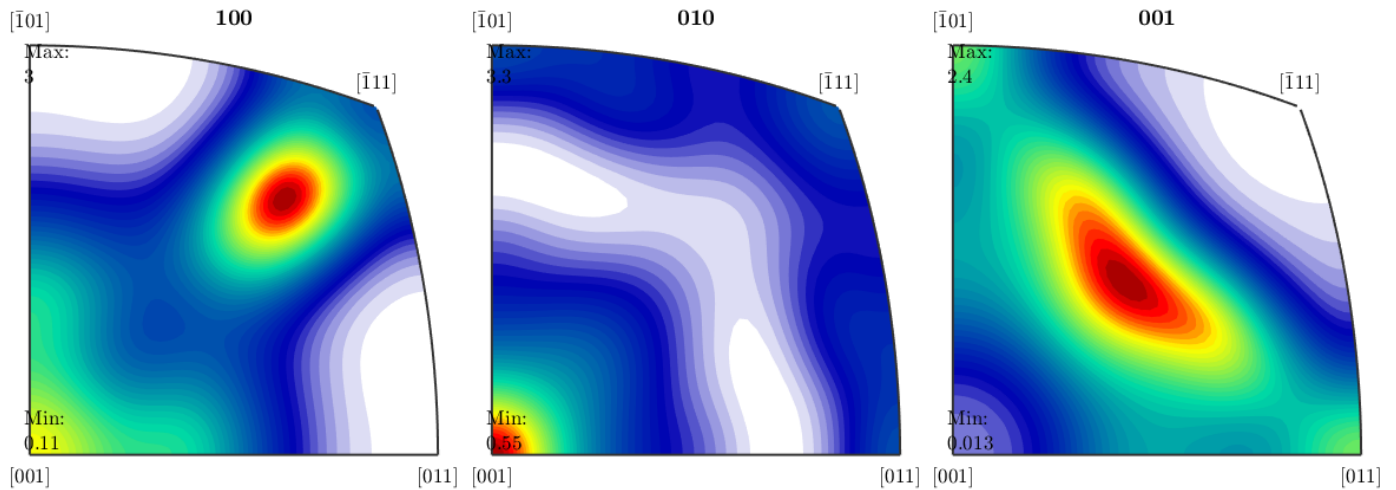
```
>> plot(rpf,'contour')
```



逆極点図描画

```
>> r=[xvector,yvector,zvector]

r = vector3d (show methods, plot)
size: 1 x 3
  x y z
  1 0 0
  0 1 0
  0 0 1
>> plotIPDF(odf,r)
```



以上作成したODF図、再計算極点図、逆極点図をE x p o r t し、CTRソフトウェアで解析を行う。

ODF 図のE x p o r t

```
>> export(odf,'ODF.TXT')
```

再計算極点図のE x p o r t

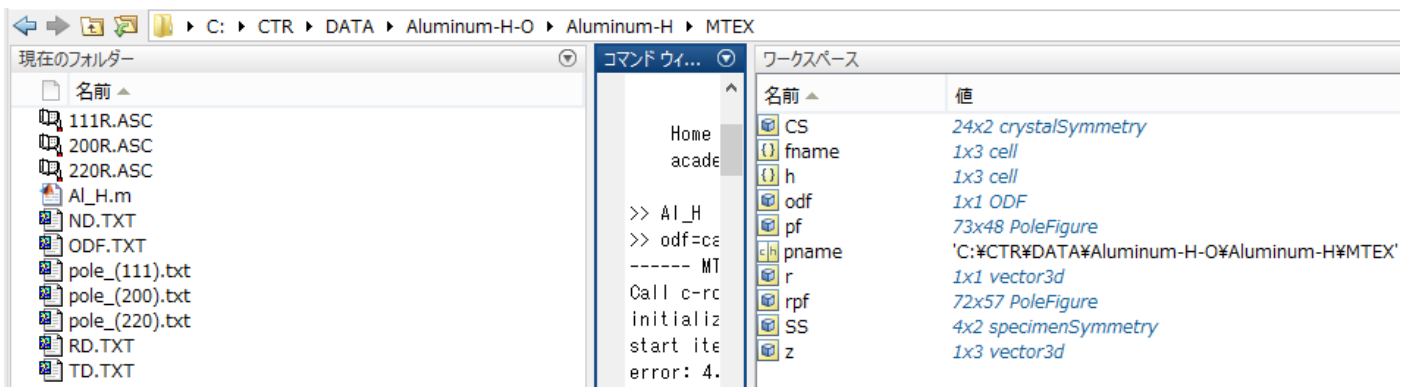
```
>> export(rpf,'pole')
```

逆極点図のE x p o r t は予め `addpath('C:/CTR/MTEX','-end')` で `exportIPDF` を登録する。

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

```
>> exportIPDF(odf,yvector,'TD.TXT')
```

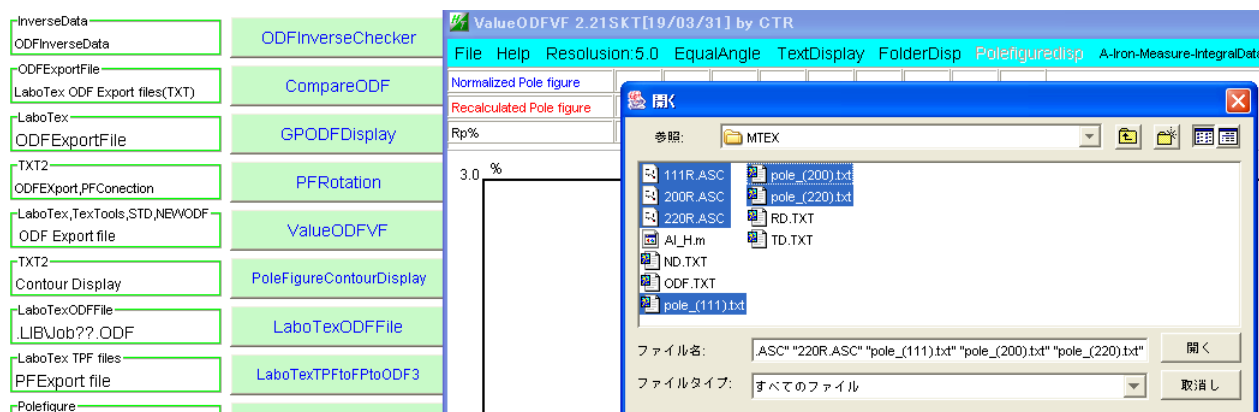
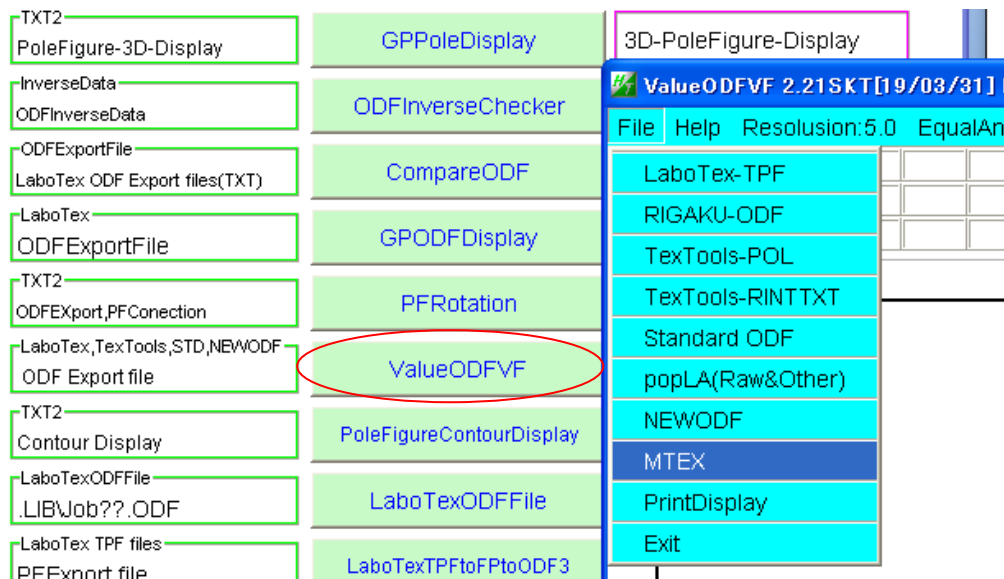
```
>> exportIPDF(odf,xvector,'RD.TXT')
```



MTEXDisplay 以前の CTR ソフトウェア

Rp%評価

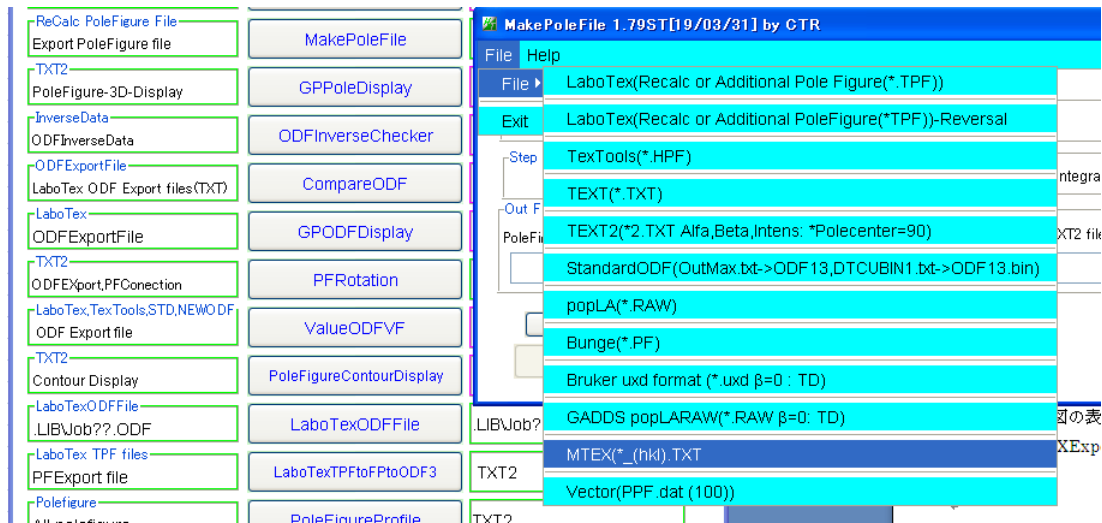
ODFAfterTools->ValueODFVF からMTEX入力極点図と再計算極点図を選択



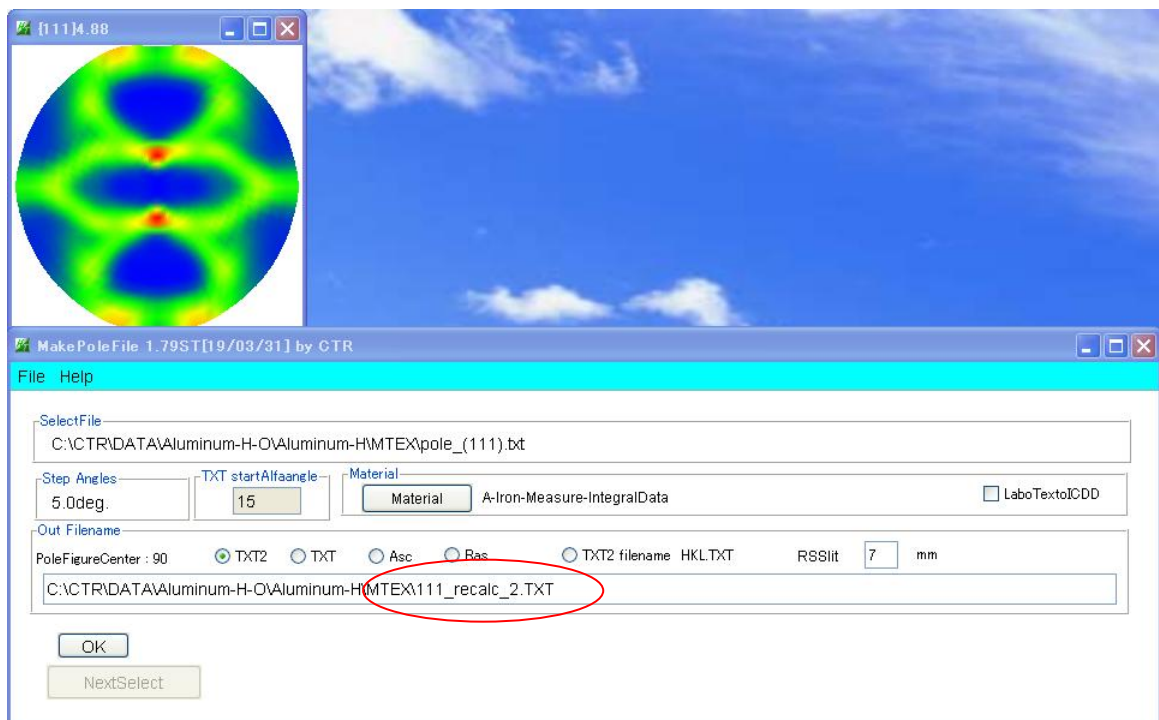
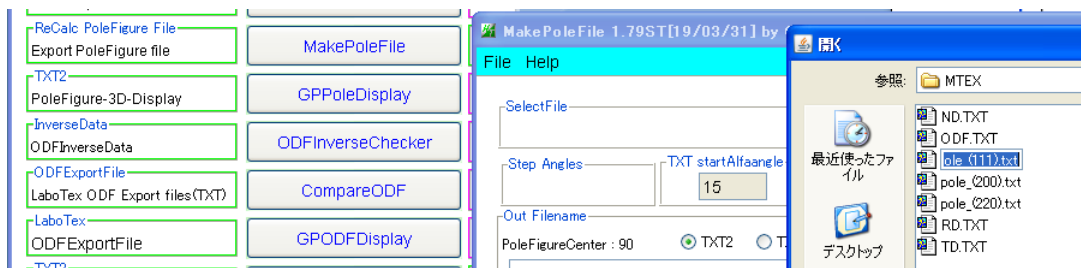
R p % = 6.6%を得る

再計算極点図の表示

極点図の表示は、GPPoleDisplay ソフトウェアで行うがファイルは TXT2 ファイル MTEXExport ファイルを TXT2 に変換後表示を行う。



変換は、複数回繰り返す。

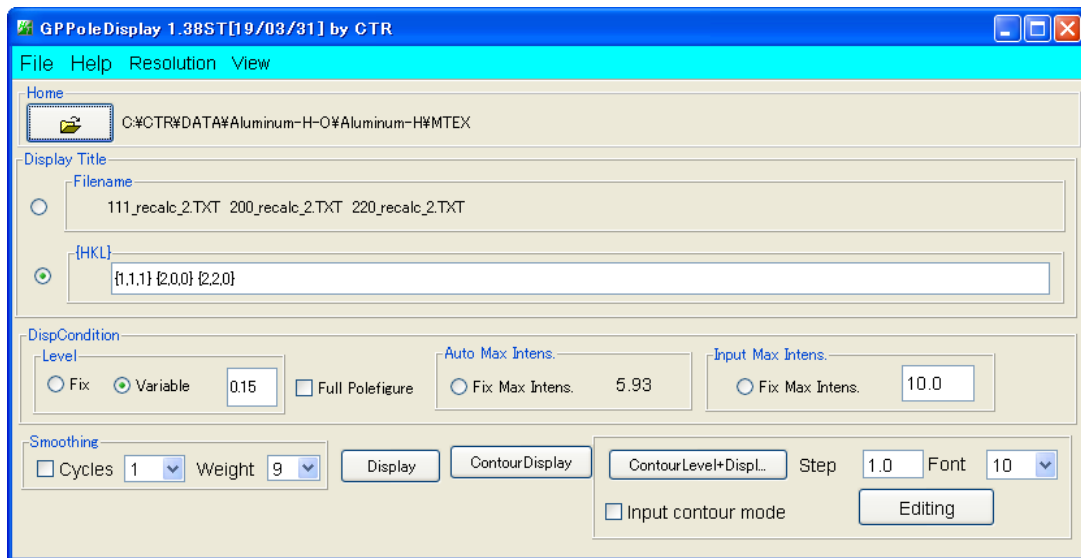


ファイル名を変更

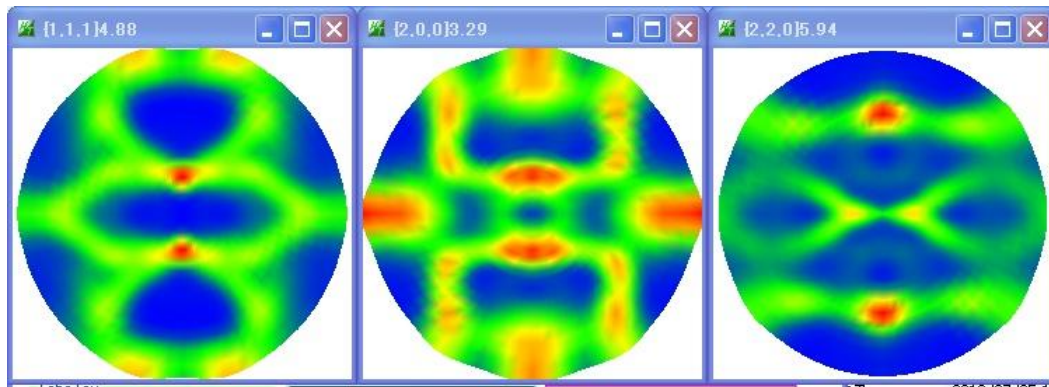
名前	サイズ	種類	更新日時
220_recalc_2.TXT	30 KB	テキスト文書	2018/07/26 7:26
200_recalc_2.TXT	30 KB	テキスト文書	2018/07/26 7:26
111_recalc_2.TXT	31 KB	テキスト文書	2018/07/26 7:26

TXT2 は (α 、 β 、密度) の並びであるが、極点図の中心は $\alpha = 90$ である。

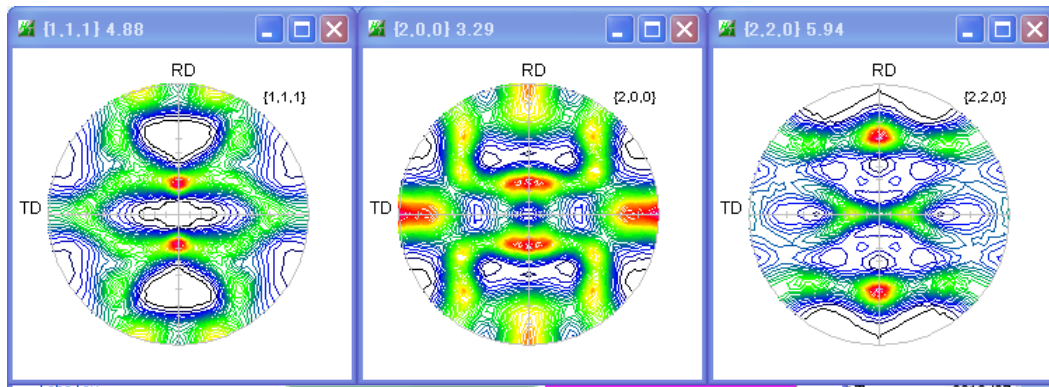
TXT 2 ファイルを GPPoleDisplay で表示



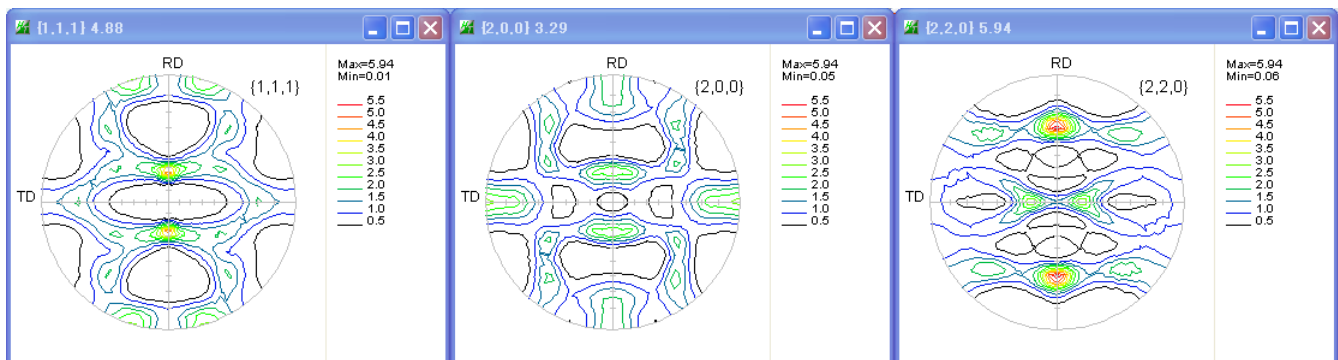
3D 表示



等高線表示

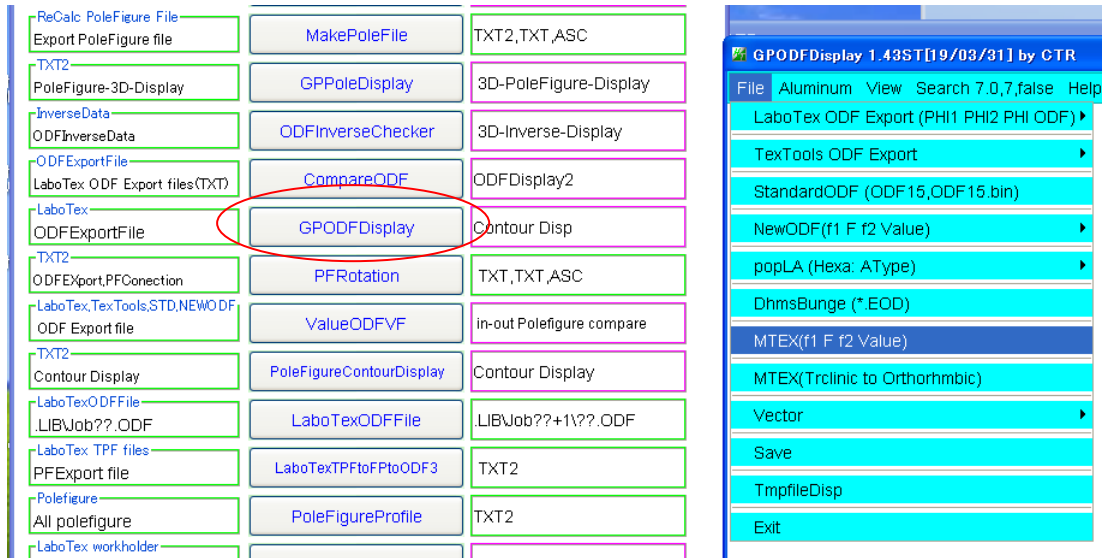


相対密度表示

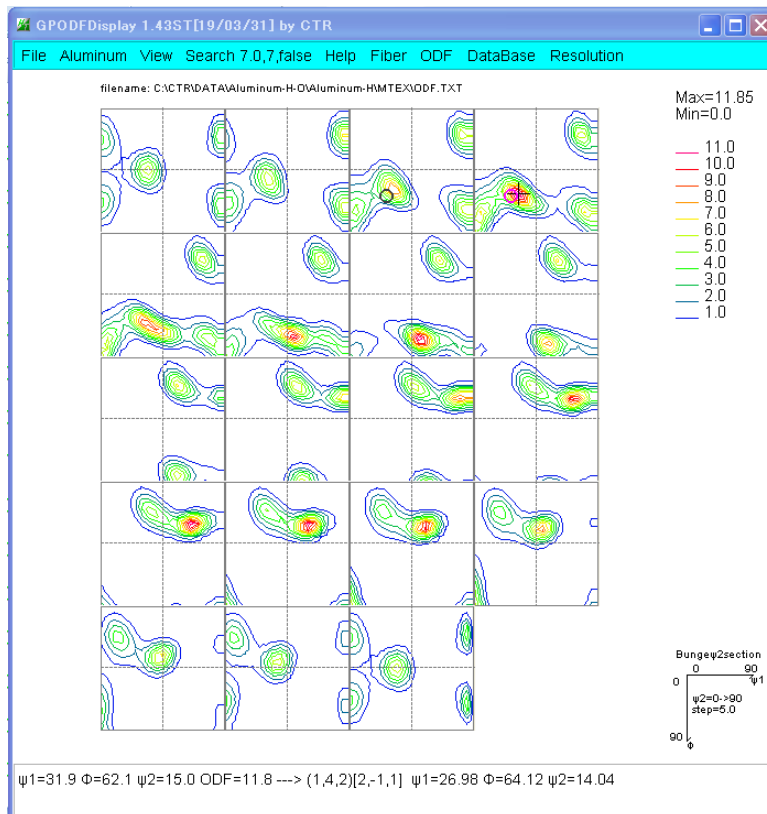


ODF 図表示

ODFAfter->GPODFDisplay



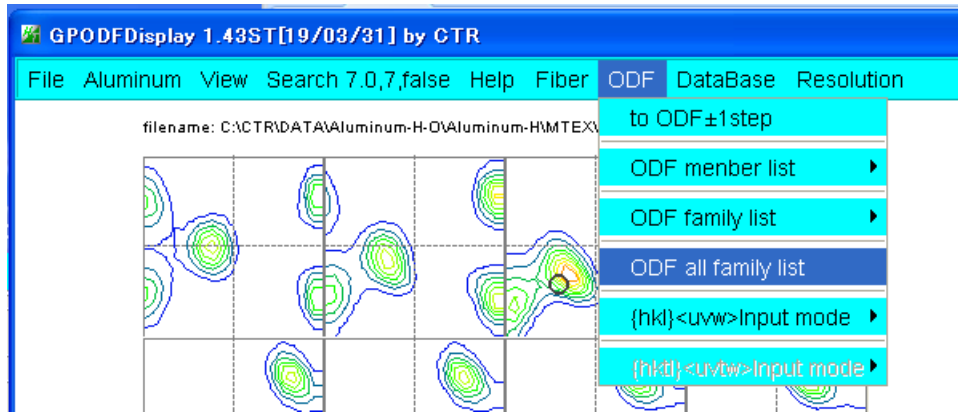
ODF.TXT を選択



GPODFDisplay の各種機能を使えます。

MTEX の Orthorhombic ファイルには f1=90 データが存在しないので、Triclinic でファイルを作成し F1=0->90 で描画も考えられる (MTEX(Triclinic->Orthorhombic)も考えられる

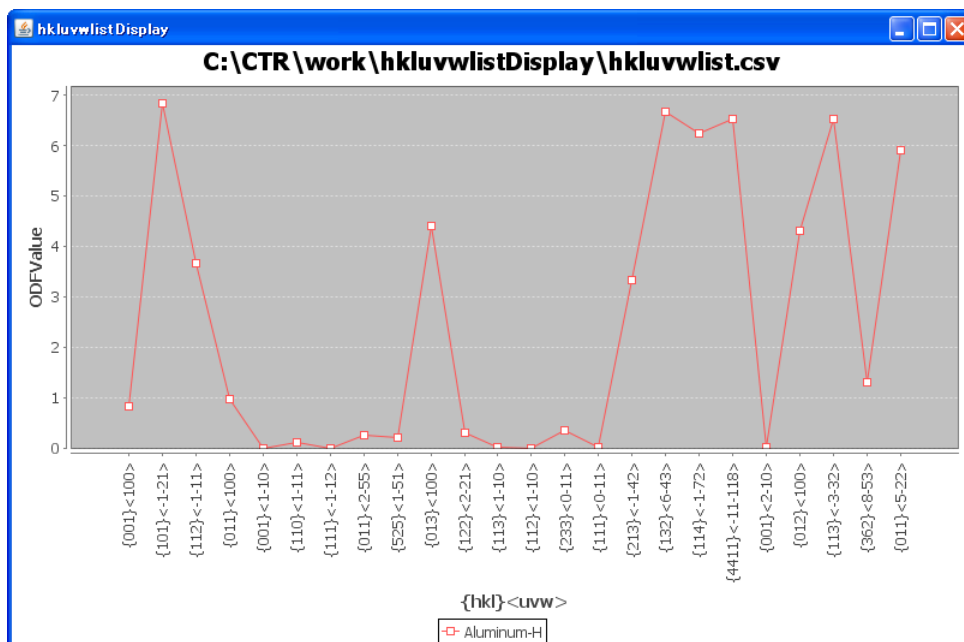
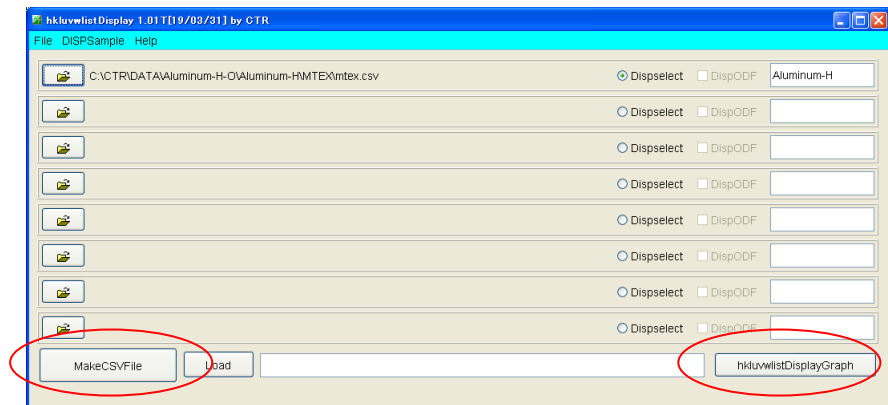
結晶方位密度計算



指定された方位密度が表示される。hkluvwlistDisplay で読み込みグラフ表示が可能

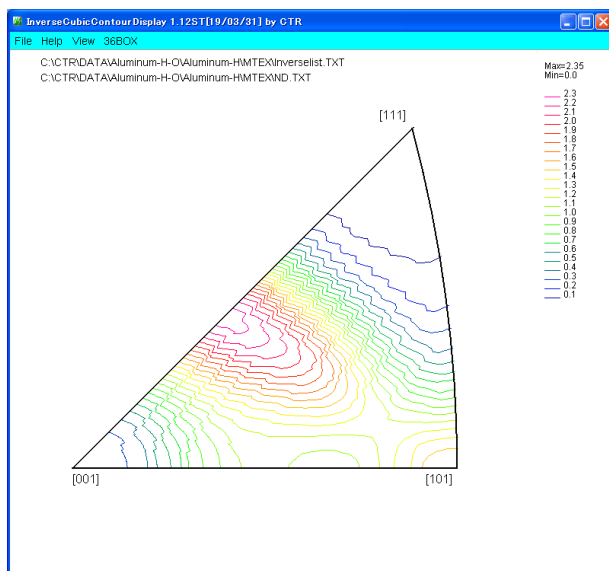
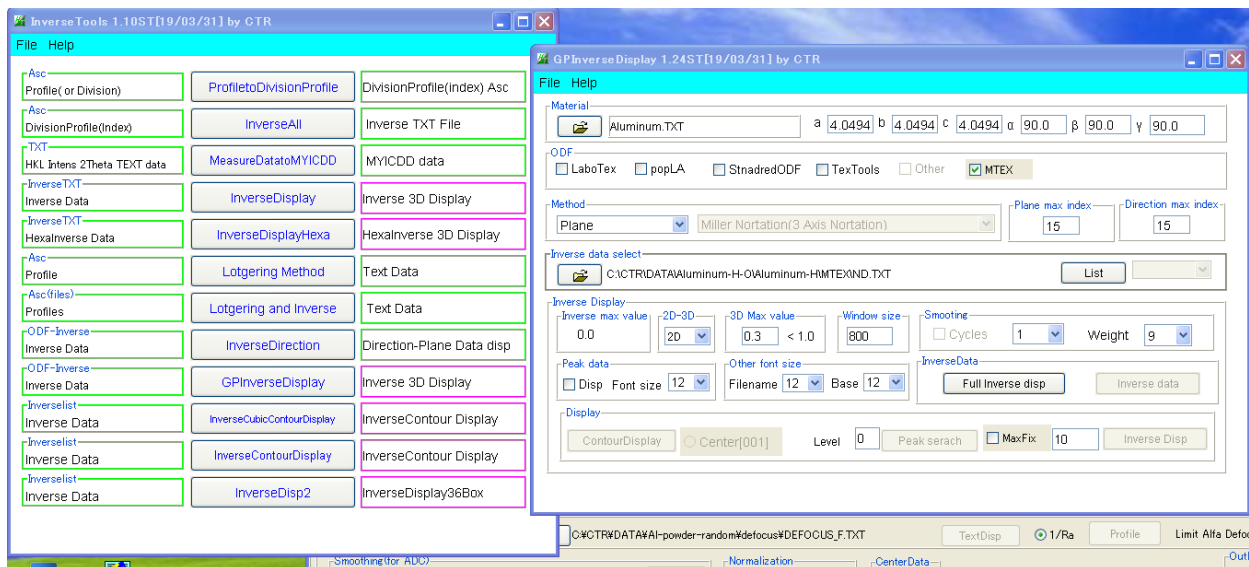
```

mtex.csv - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表
{hkl}<uvw>,mtex
[001]<100>,0.83
[101]<-1-21>,6.84
[112]<-1-11>,3.68
[011]<100>,0.97
[001]<1-10>,0.0
[110]<1-11>,0.12
[111]<-1-12>,0.0
[011]<2-55>,0.27
[525]<1-51>,0.21
[013]<100>,4.4
[122]<2-21>,0.31
[113]<1-10>,0.02
[112]<1-10>,0.0
[233]<0-11>,0.37
[111]<0-11>,0.03
[213]<-1-42>,3.33
[132]<6-43>,6.68
[114]<-1-72>,6.24
[4411]<-11-118>,6.52
[001]<2-10>,0.03
[012]<100>,4.31
[113]<-3-32>,6.52
[362]<8-53>,1.32
[011]<5-22>,5.92
    
```

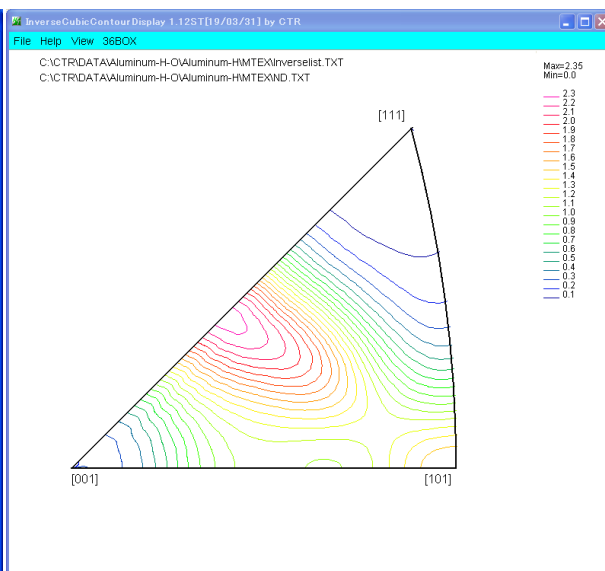


逆極点図表示

InverseTools->GPInverseDisplay



変換縞模様が發生する・

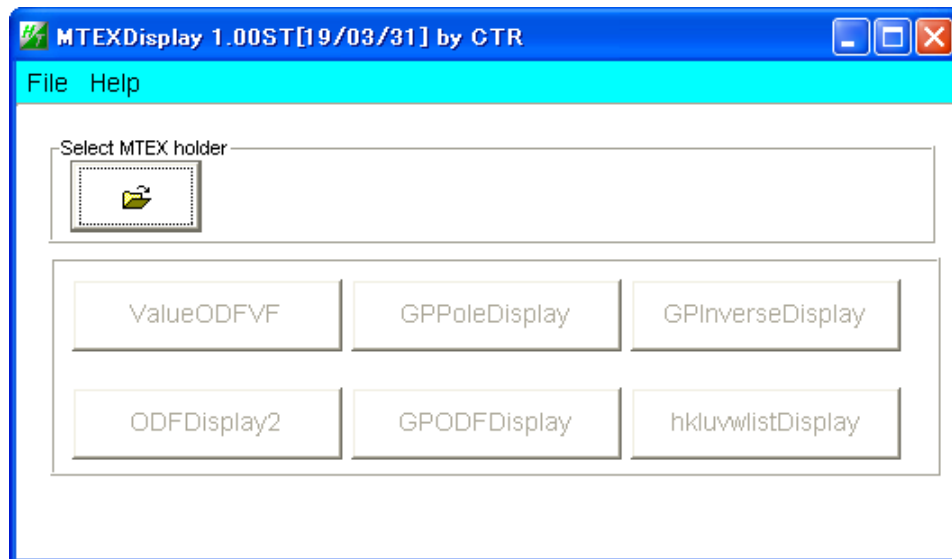


平滑化を行う

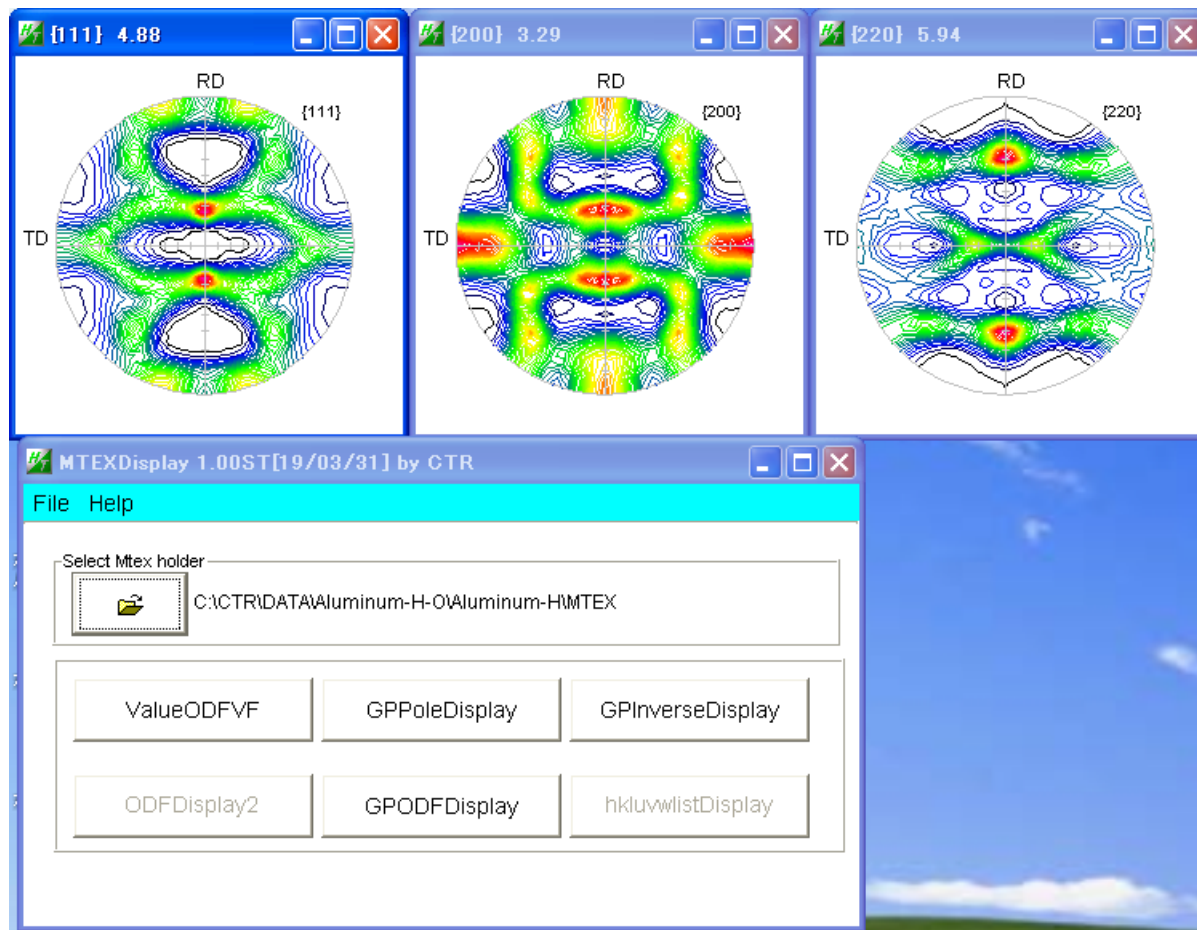
MTEX Displayは、操作性と逆極点図の改善を目的としています。

MTEXDisplay 操作

MTEXのホルダを選択



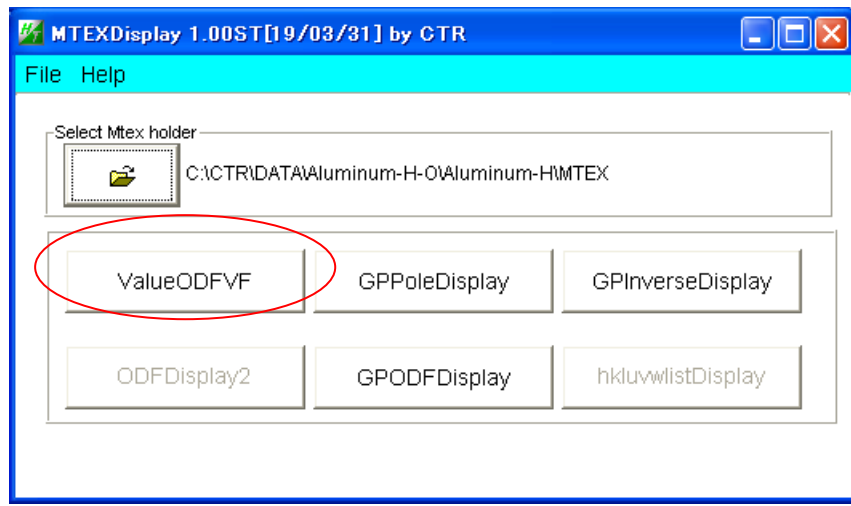
MTEXホルダをサーチし、処理可能なプロウラムをenableとし、再計算極点図をTXT2フォーマットに変換し、workホルダにファイルを作成し、表示



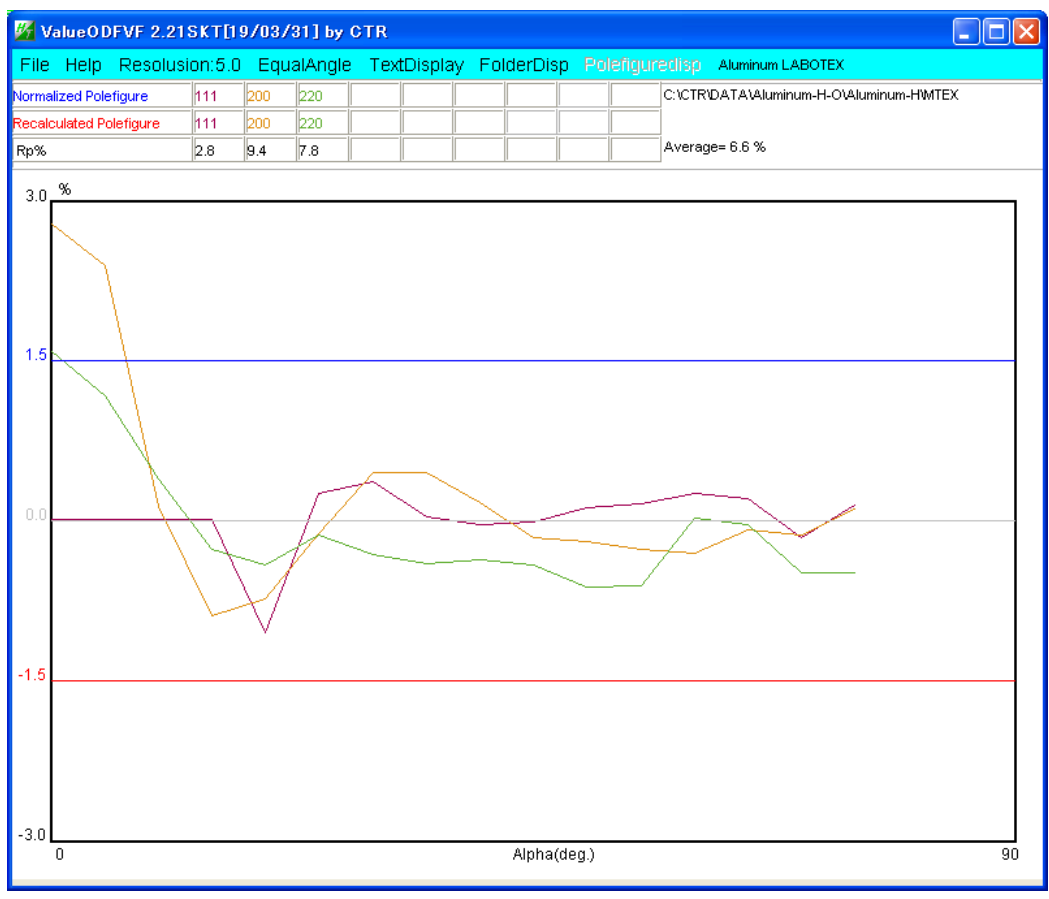
C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-H\MTEX\work

名前	サイズ	種類	更新日時
111rpole_2.TXT	31 KB	テキスト文書	2018/07/26 14:46
200rpole_2.TXT	30 KB	テキスト文書	2018/07/26 14:46
220rpole_2.TXT	30 KB	テキスト文書	2018/07/26 14:46

Rp %評価 ValueODFVF



ValueODFVFにてRp%の計算を行う



入力極点図 {200} の中心部分が計算結果より高いと計算されています。

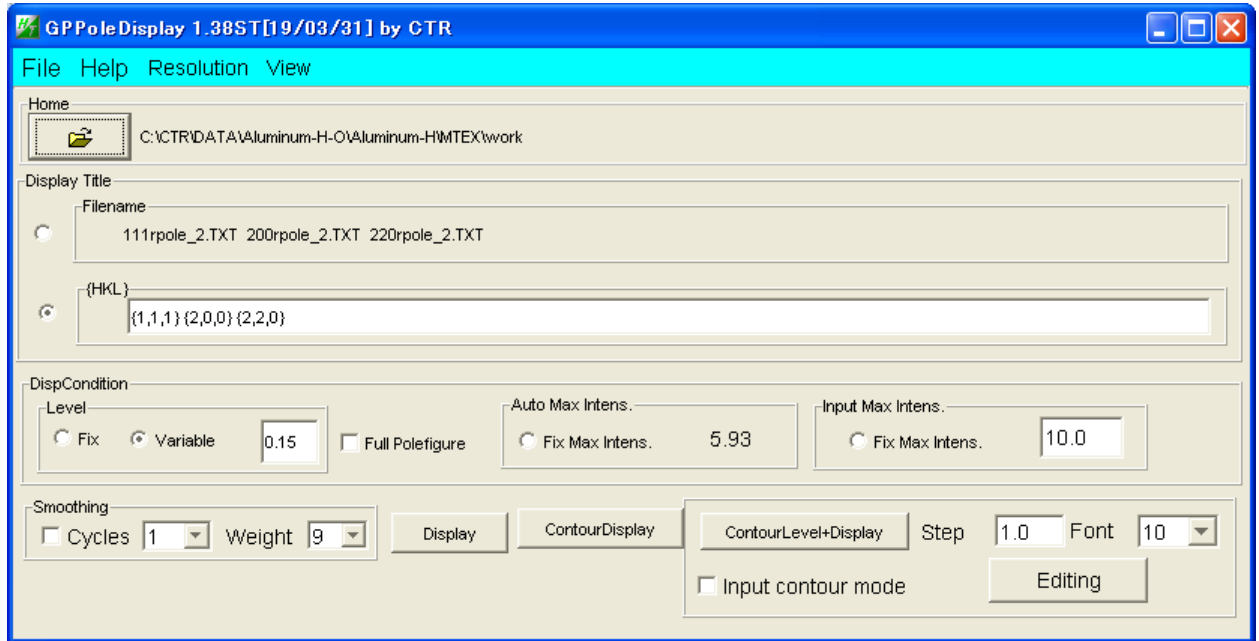
操作方法の詳細は説明書で確認してください。

GPPoleDisplay

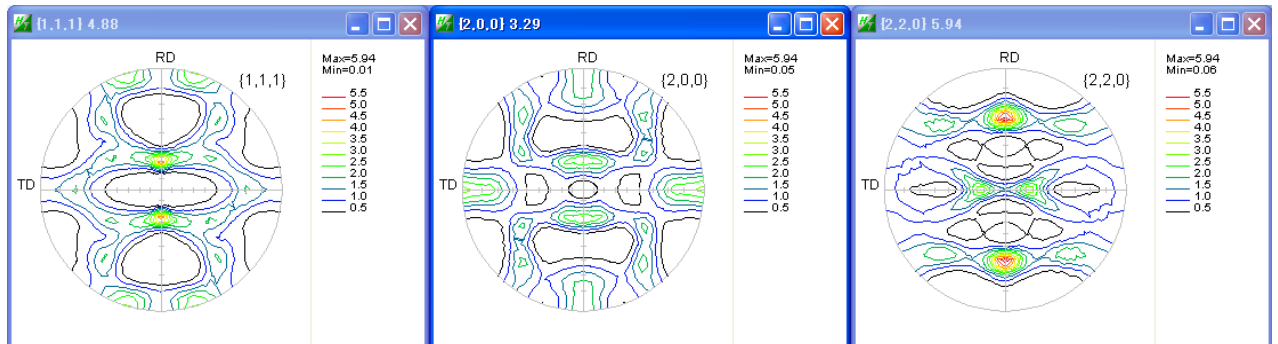
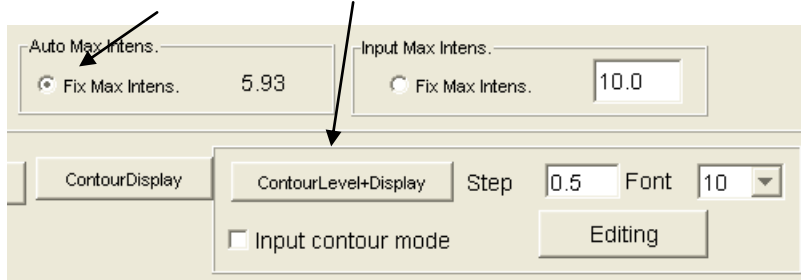
再計算極点図の表示

再計算極点図の T X T2 ファイルは、work ホルダに作成されています。

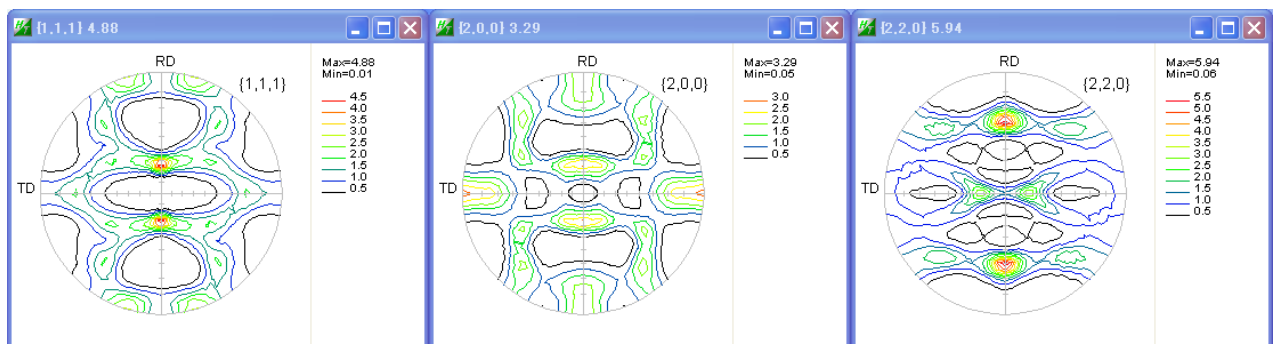
G P P o l e D i s p l a y ソフトウェアを用いて、各種表現を利用します。



極点図最大密度に対する等高線を表示



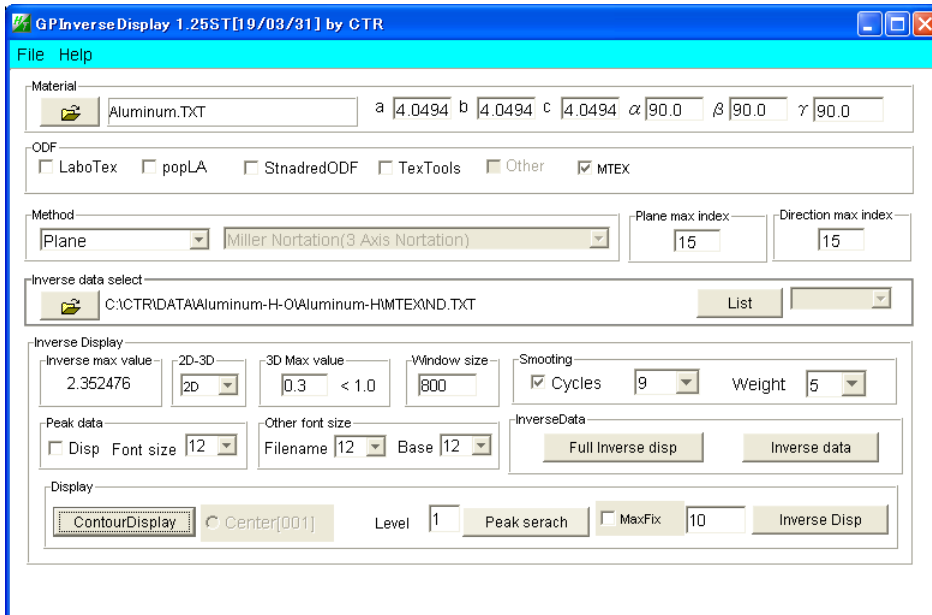
F i x なしでは



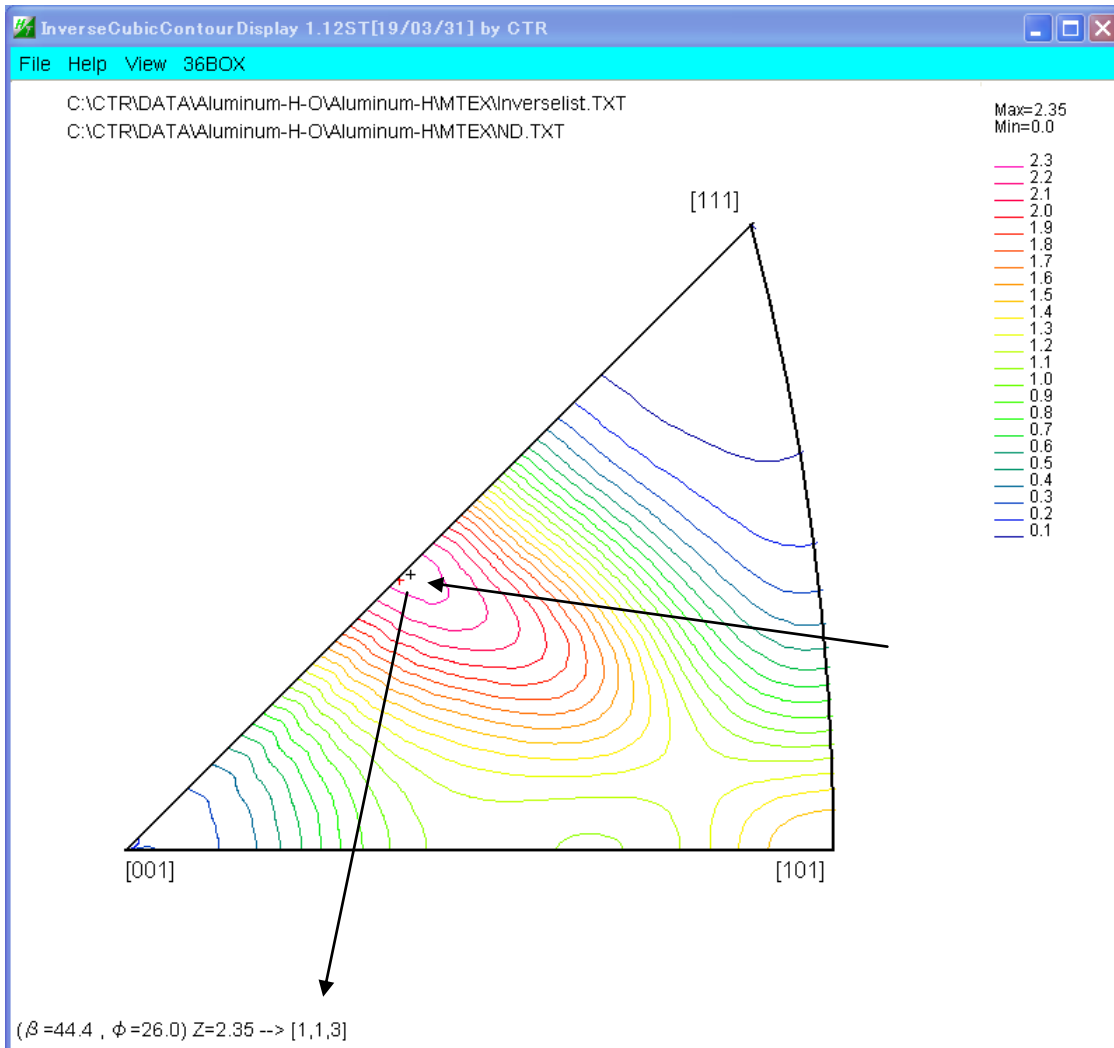
GPInverseDisplay

逆極点図表示 GPInverseDisplay で

ND 方向の逆極点図が表示される、RD,TD はファイル選択を行ってください。

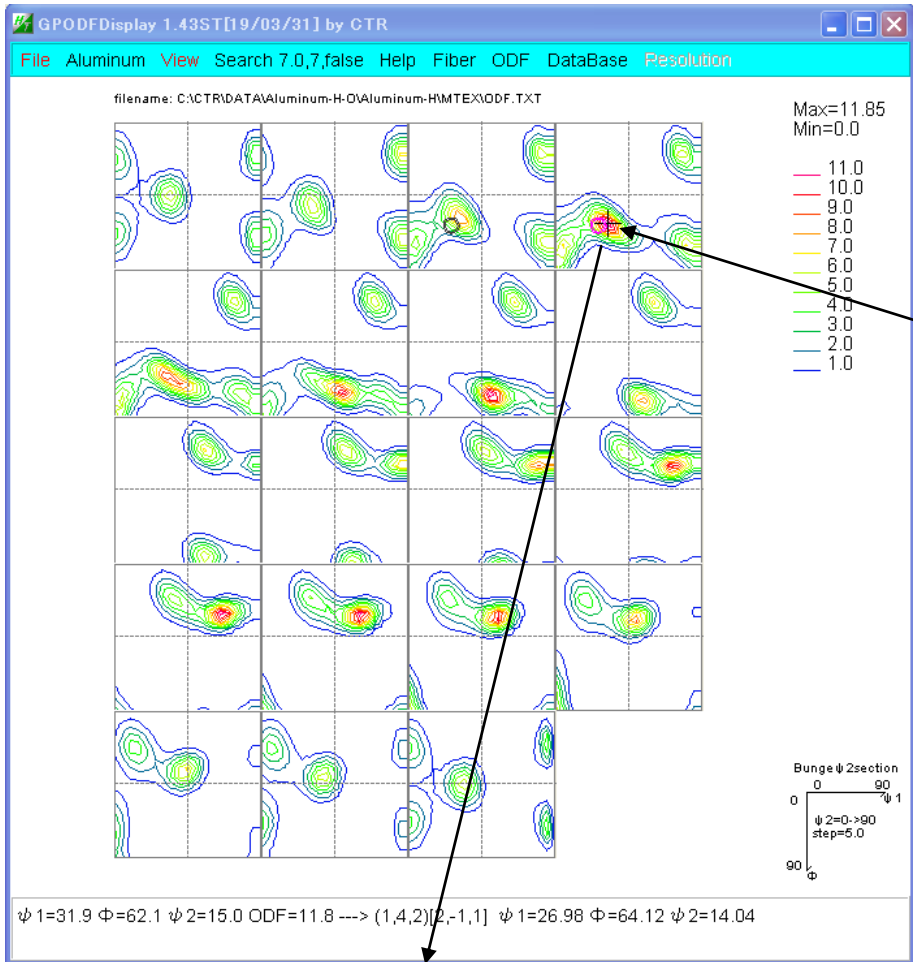


Full Inverse Disp->Inverse data->CountourDisplay



等高線最大方位位置にマウスを移動すると、方位[113]が得られる

ODF図表示 GPODFDisplay で

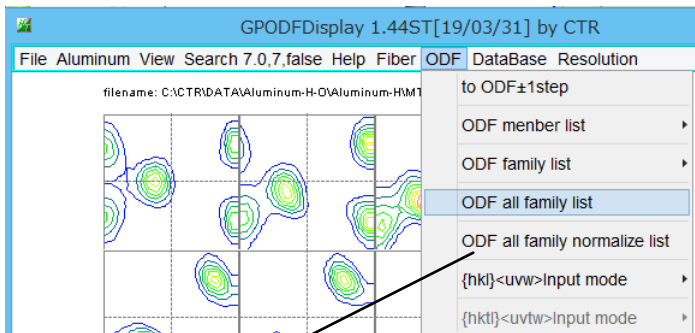


マウサーソルの最大方位密度位置で{142}<2-11>を得る
結晶方位のサーチは

```

mtex.csv - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O)

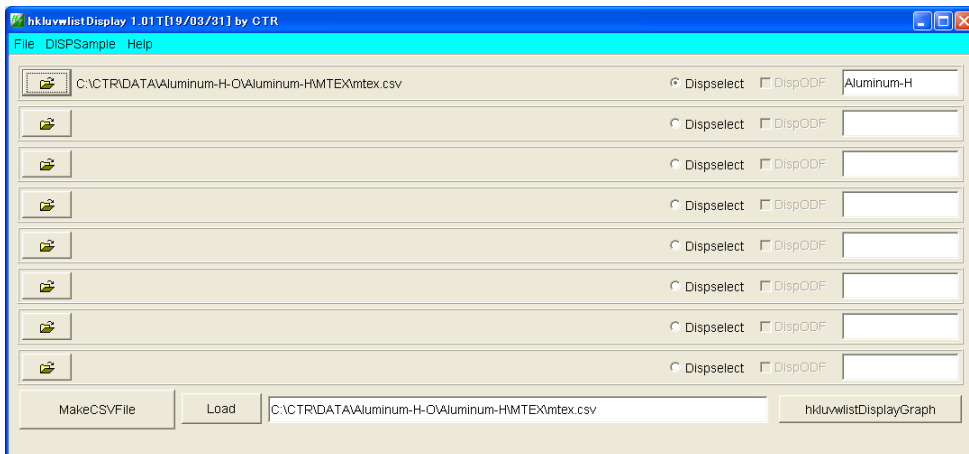
[hkl]<uvw>,mtex      norm[hkl]<uvw>,mtex
{001}<100>,0.83      [001]<100>,0.415
{101}<-1-21>,6.84    [101]<-1-21>,6.84
{112}<-1-11>,3.68    [112]<-1-11>,3.68
{011}<100>,0.97      [011]<100>,0.485
{001}<-1-10>,0.0     [001]<-1-10>,0.0
[110]<-1-11>,0.12    [110]<-1-11>,0.12
[111]<-1-12>,0.0     [111]<-1-12>,0.0
{011}<-2-55>,0.27    [011]<-2-55>,0.27
[525]<-1-51>,0.21    [525]<-1-51>,0.21
[013]<100>,4.4       [013]<100>,4.4
[122]<-2-21>,0.31    [122]<-2-21>,0.62
[113]<-1-10>,0.02    [113]<-1-10>,0.02
[112]<-1-10>,0.0     [112]<-1-10>,0.0
[233]<0-11>,0.37     [233]<0-11>,0.37
[111]<0-11>,0.03     [111]<0-11>,0.03
[213]<-1-42>,3.33    [213]<-1-42>,6.66
[132]<-6-43>,6.68    [132]<-6-43>,13.36
[114]<-1-72>,6.24    [114]<-1-72>,12.48
[4411]<-11-118>,6.52 [4411]<-11-118>,6.52
[001]<-2-10>,0.03    [001]<-2-10>,0.03
[012]<100>,4.31      [012]<100>,4.31
[113]<-3-32>,6.52    [113]<-3-32>,6.52
[362]<-8-53>,1.32    [362]<-8-53>,2.64
[011]<-5-22>,5.92    [011]<-5-22>,5.92
    
```



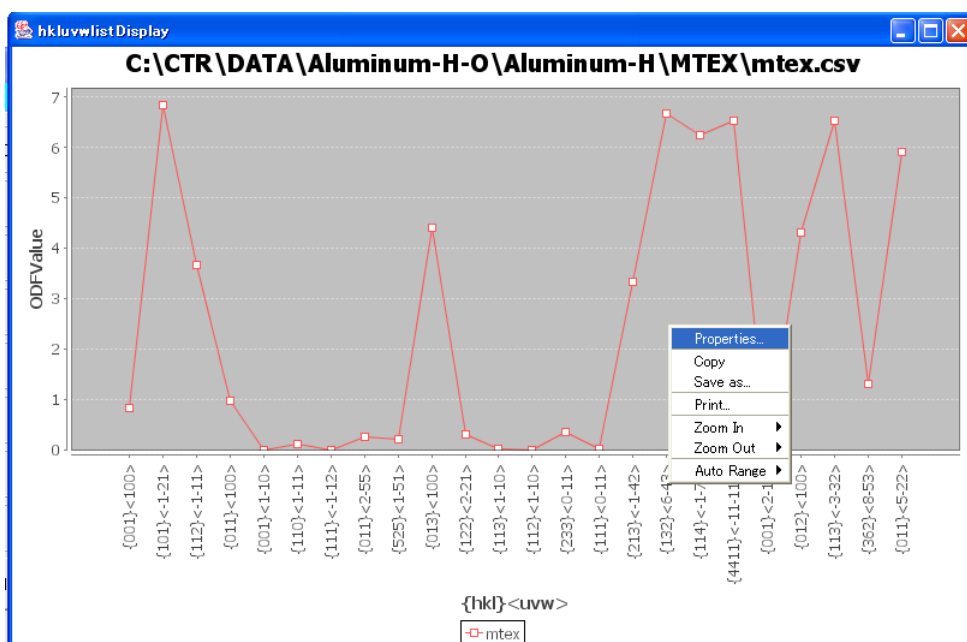
方位密度分布の数値化は、`hkluvwlistDisplay`を用いる
`normalize list` では結晶方位の多重性を考慮した計算が行われます。

方位によって、4 : 2 : 1の方位を0.5 : 1 : 2の係数で計算します。

結晶方位密度の数値化 hkluvlistDisplay にて



hkluvdisplayGraph を KeyIn で



表示されます。

Normalize を同一画面に表示する場合、タイトルを変更する。

