

# Mg合金のMTEX解析

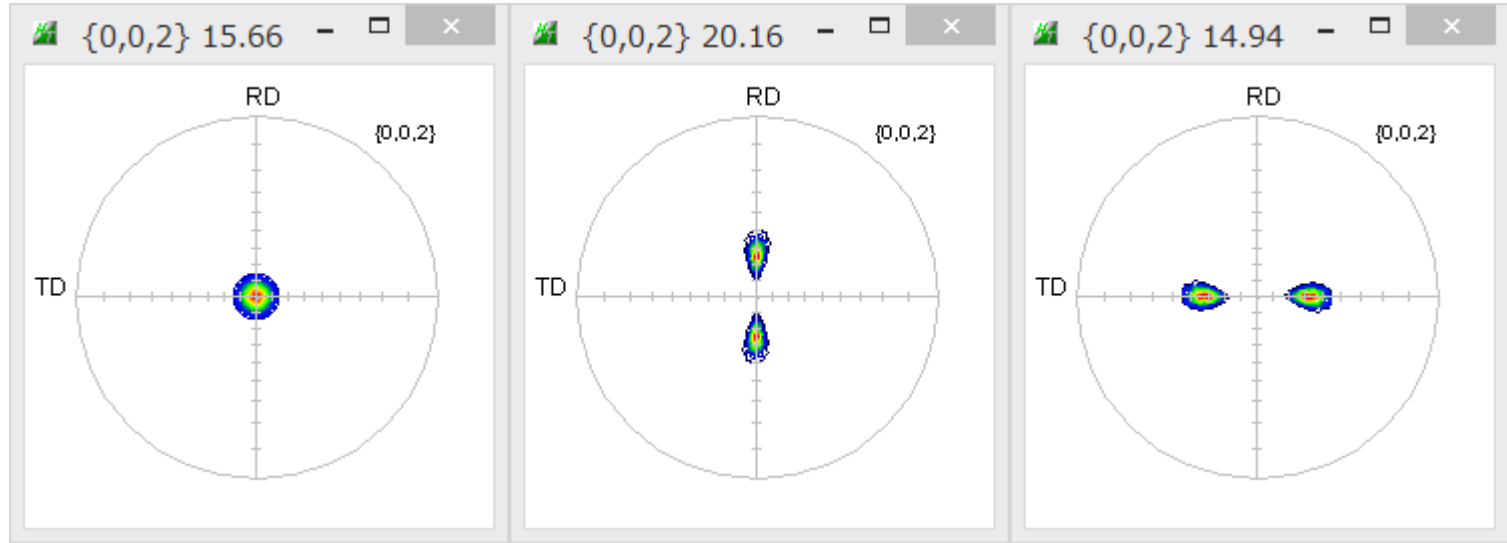
Ti, Mgで見られる極点図  
測定データ解析(バックグラウンド、吸収、defocus)  
MTEX入力データの作成  
ODF解析  
ODF図、極点図、逆極点図のExport  
入力極点図と再計算極点図から入力データ評価  
ODF図の解析  
逆極点図の解析  
極点図の解析  
参考資料

2019年03月07日

HelperTex Office

山田 義行

# Mg合金をMTEXで解析



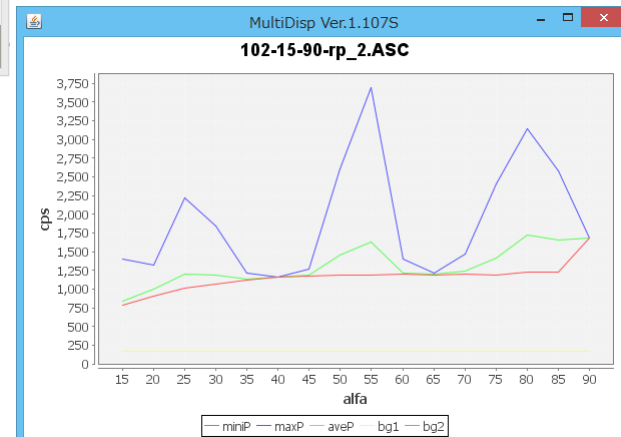
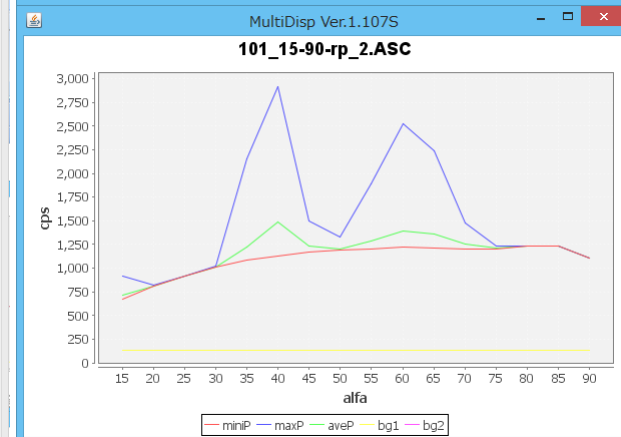
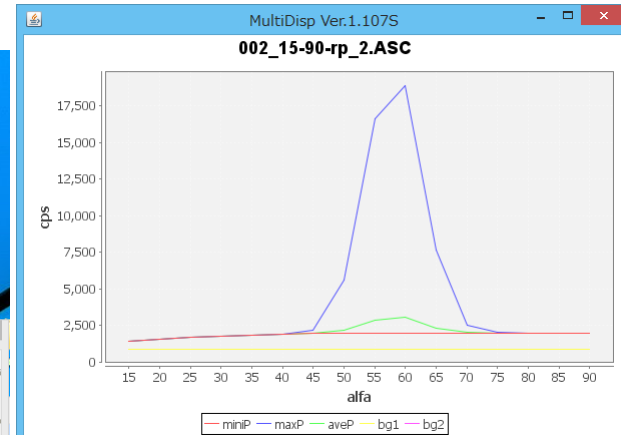
Basal

RD-split

TD-split

# バックグラウンド

The screenshot shows the ODF software interface. At the top, three pole figures are displayed for different hkl values: {0,0,2}, {1,0,1}, and {1,0,2}. Below them is the main configuration window titled "ODFPoleFigure2 3.82SKT[19/03/31] by CTR". The window includes sections for "Files select", "Calculation Condition", "Background delete mode", "Smoothing", "AbsCalc", and "Defocus file Select". A blue arrow points from the text below to the "BGMode Measure" button in the "Files select" section.



バックグラウンドは、極点測定2θから3度位離れた位置の強度を測定  
右図で黄色、バックグラウンド強度が以上の場合、編集する

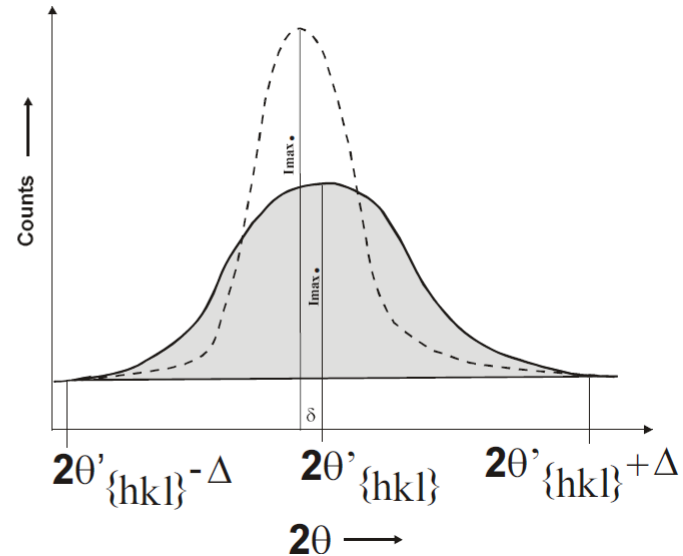
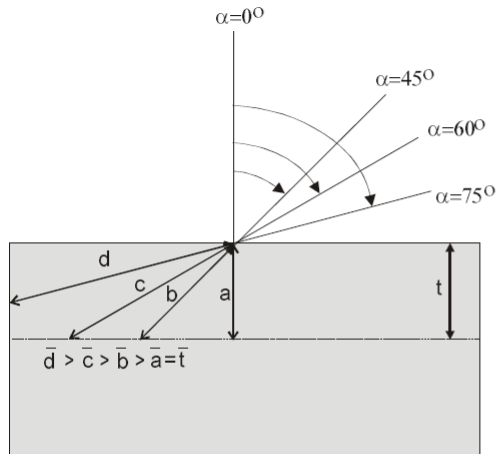
Menu items under "BGMode Measure": Measure, Straight(Optional), Defocus(Optional), Measure(Calc), Minimum, All background.

ToolKit->SoftWare->Pagenext

PoleBackgroundEditor

# Defocus

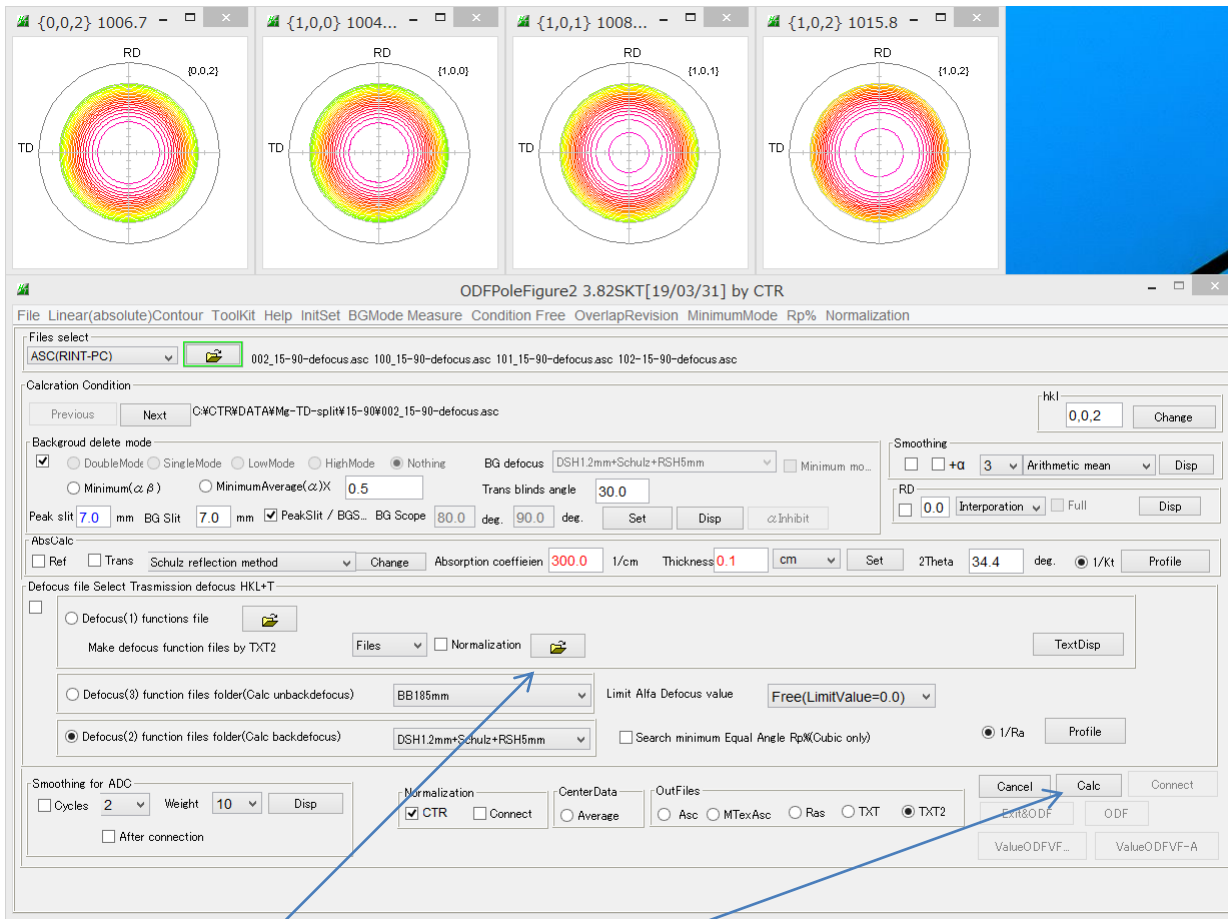
XRDで極点測定を行うと、defocusにより回折線が広がり、極点図の外周向け強度が低下する



有限な受光スリット幅から回折ピークからはみ出る → 強度低下

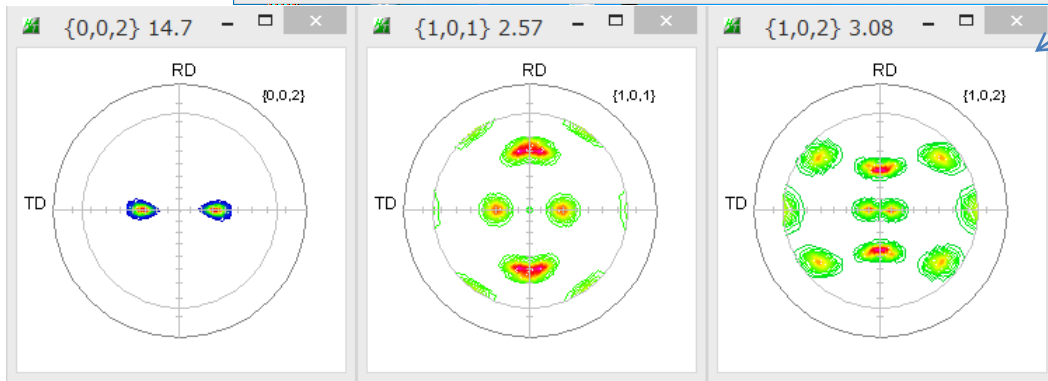
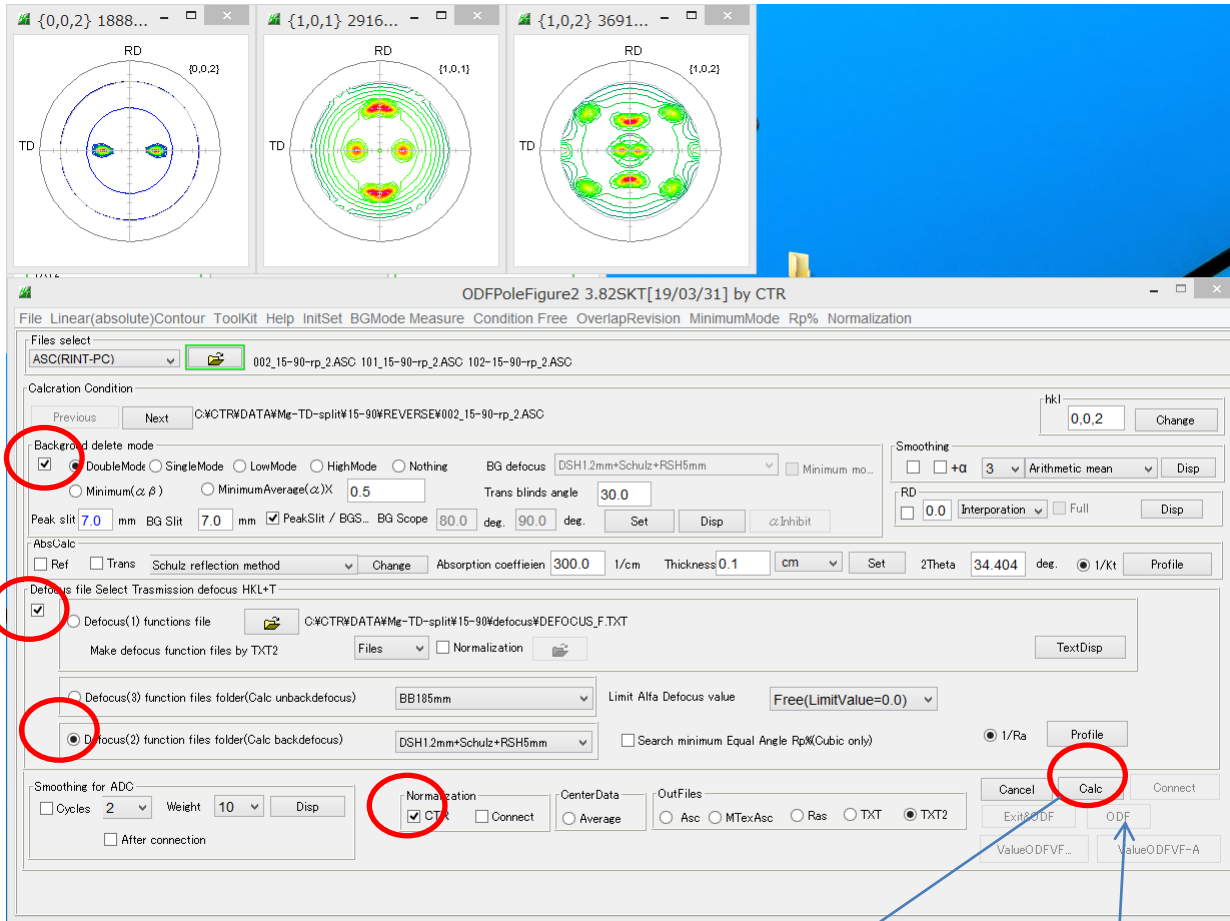
この補正に無配向試料で補正する。

# Defocus補正 (defocusTABLE) 作成



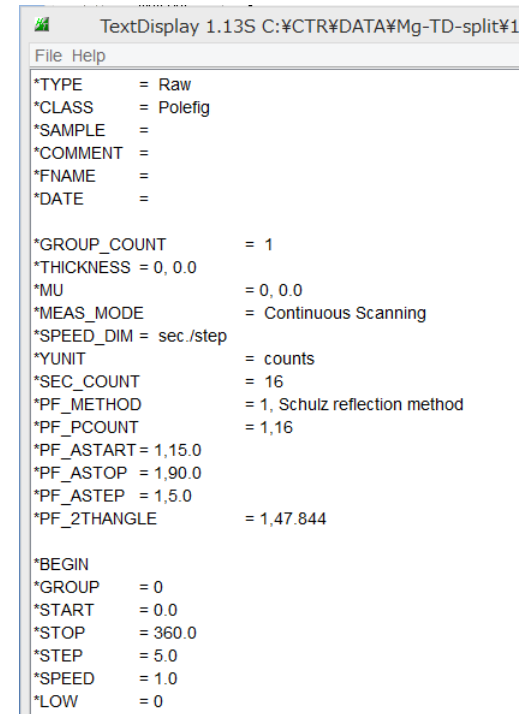
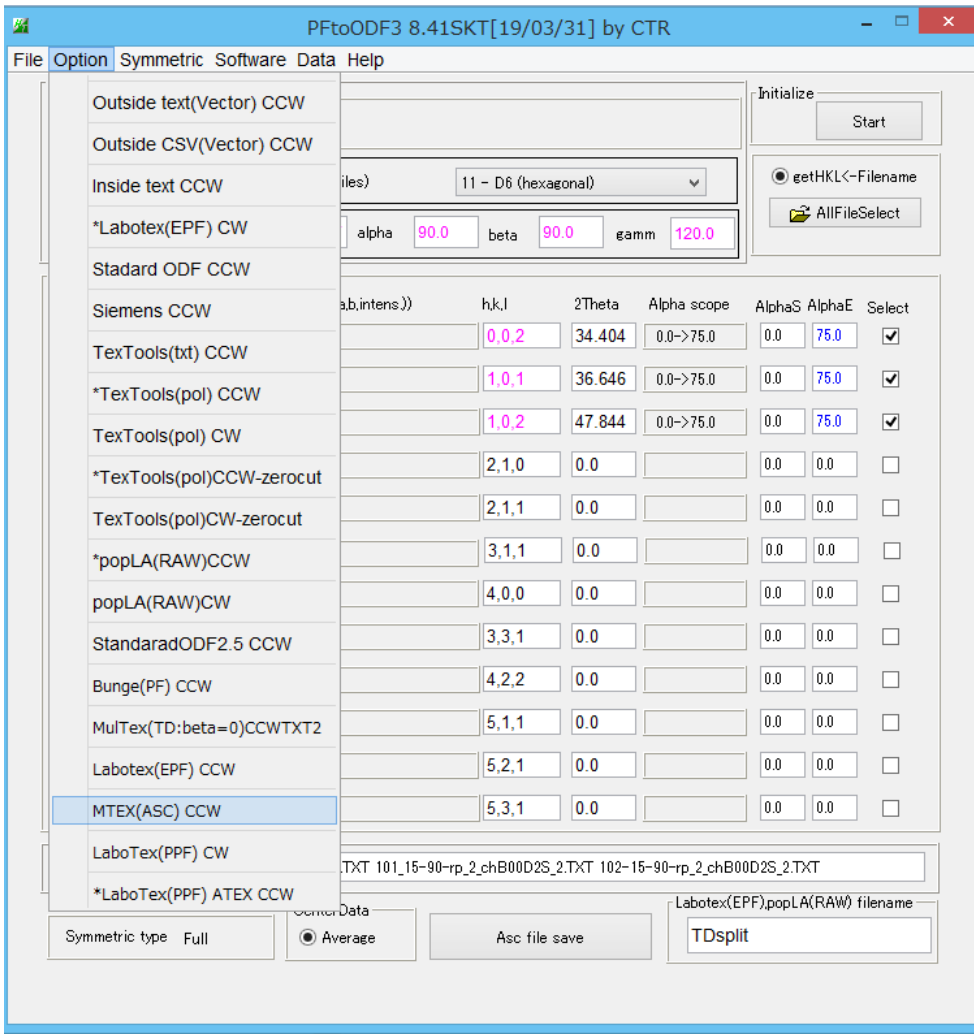
バックグラウンド削除し、CalcでTXT2ファイル作成  
TXT2を選択し、TABLE作成する。

# 内部defocusTABLEで補正

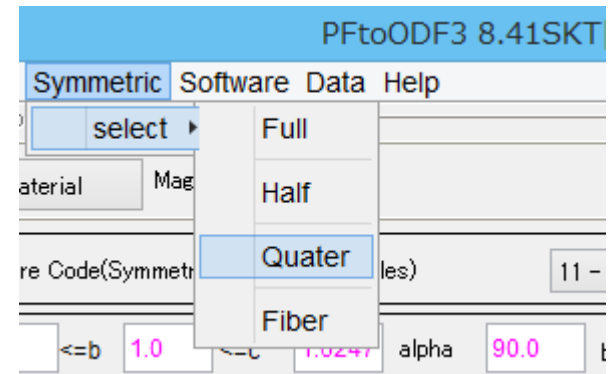


外周付近の密度がアップします。  
ODFでMTEX向けデータ作成

# MTEX入力データ作成



Triclinic→Orthorombic

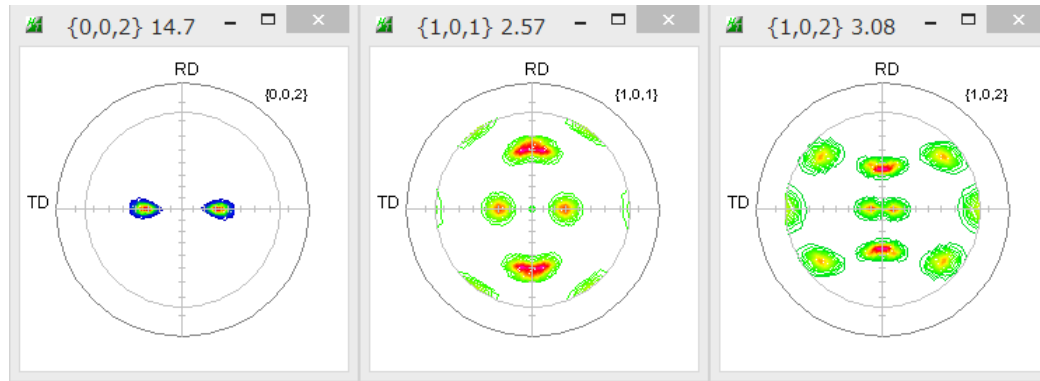


対称ODF図を得るために、1/4対称極点図とする

# MTEX

MTEXはMatLab環境下で動作する無料のODF解析ソフトウェア  
インストールは、MTEX-start.pdfを参考にしてください。

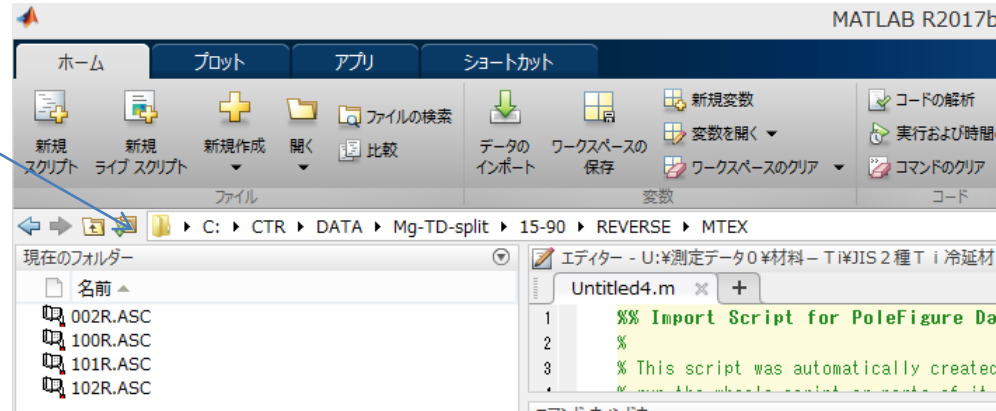
MTEXの説明は、Mg-TD-Split、Triclinic → Orthorombicで説明します。  
入力極点図は、BG削除、defocus補正したASCデータとします。





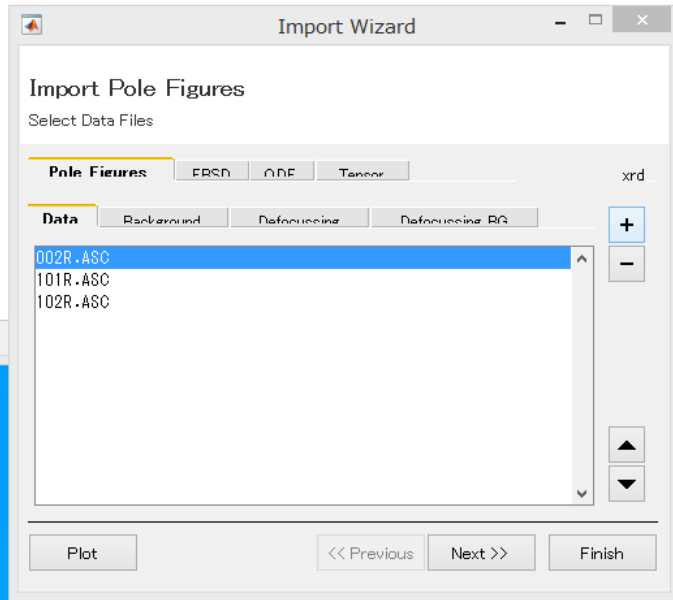
# MTEX (データ指定)

作業holder指定

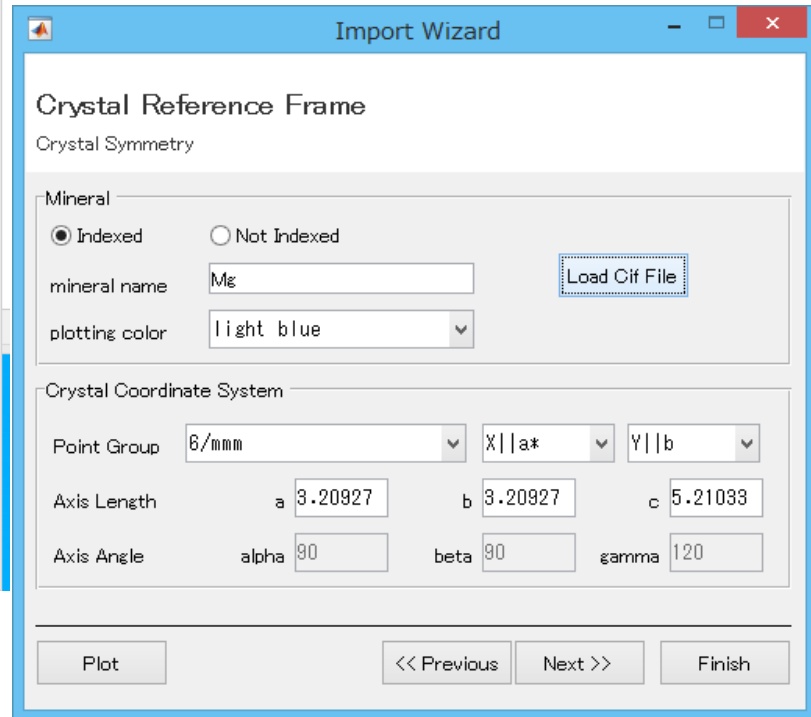


データ入力(import\_wizard)

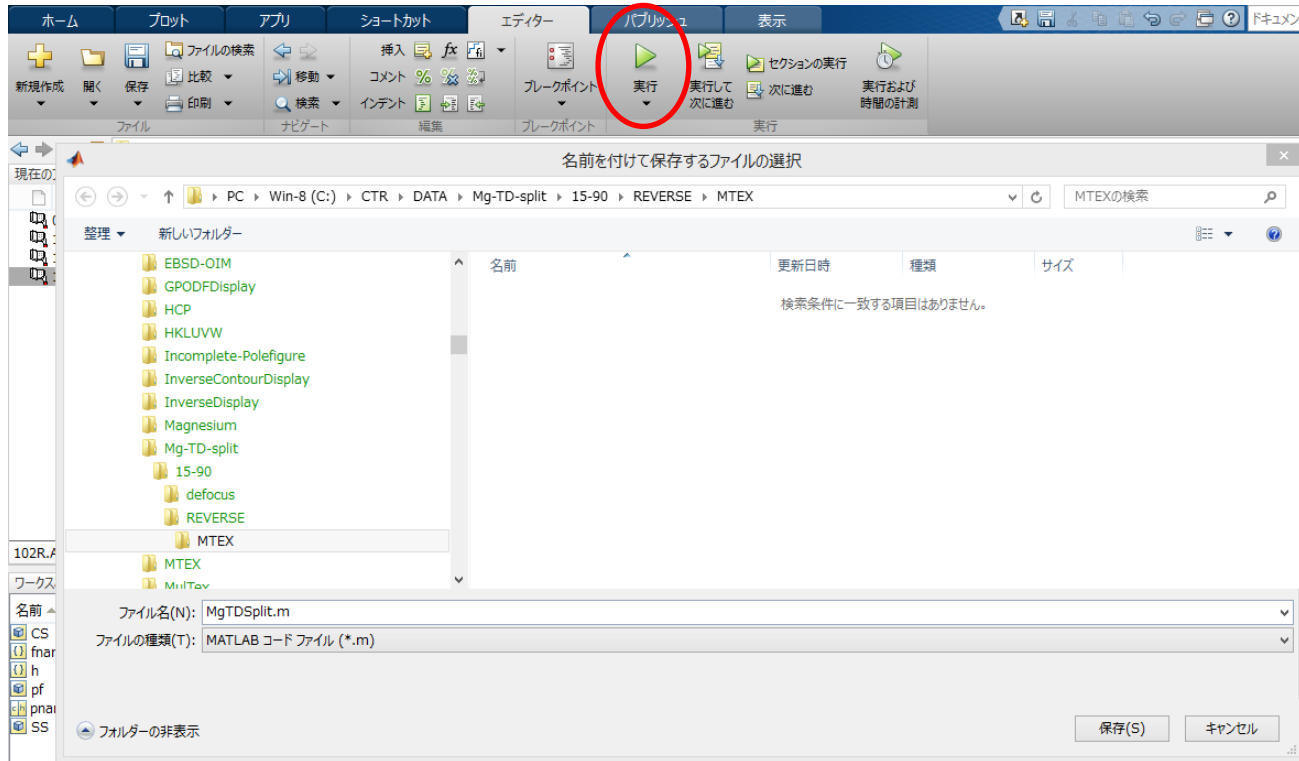
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
>>  
import\_wizard



Mg選択、合金の場合、格子定数修正



# MTEX (Mファイル作成し、データ読み込み)

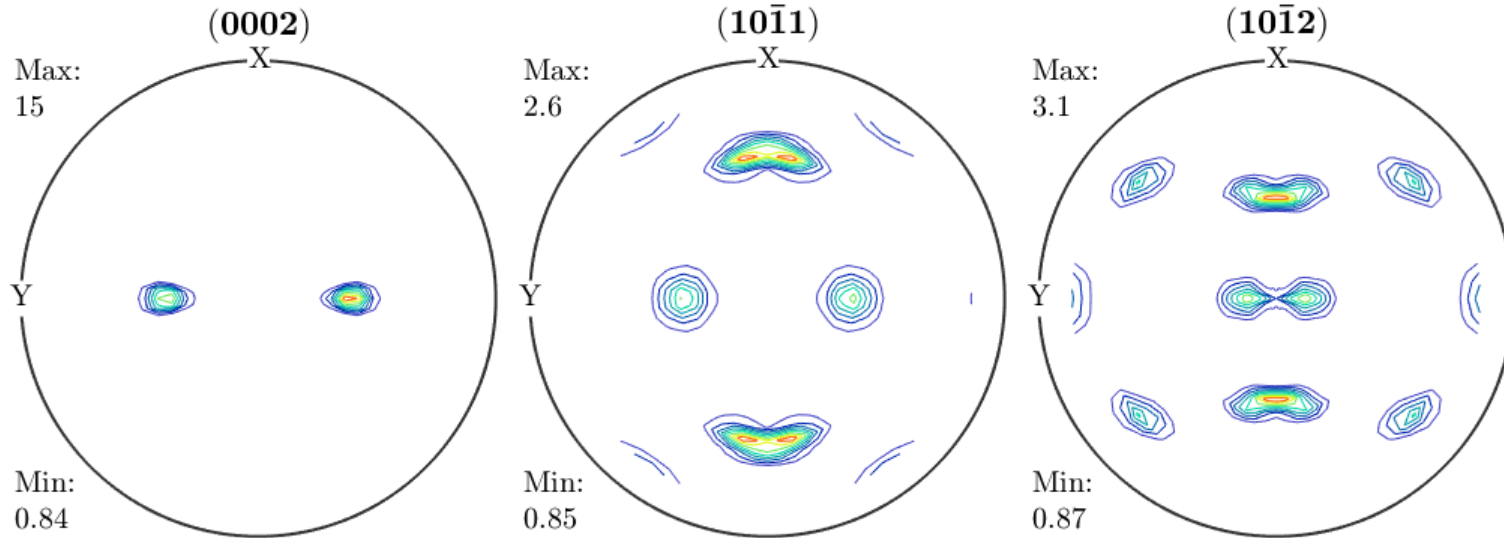


極点図が読み込まれる。

名前 ▲	値
CS	12x2 crystalSymmetry
fname	1x3 cell
h	1x3 cell
pf	73x48 PoleFigure
pname	'C:¥CTR¥DATA¥Mg-TD-split¥15-90¥RE
SS	1x1 specimenSymmetry

# MTEX(極点図表示、ODF計算)

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

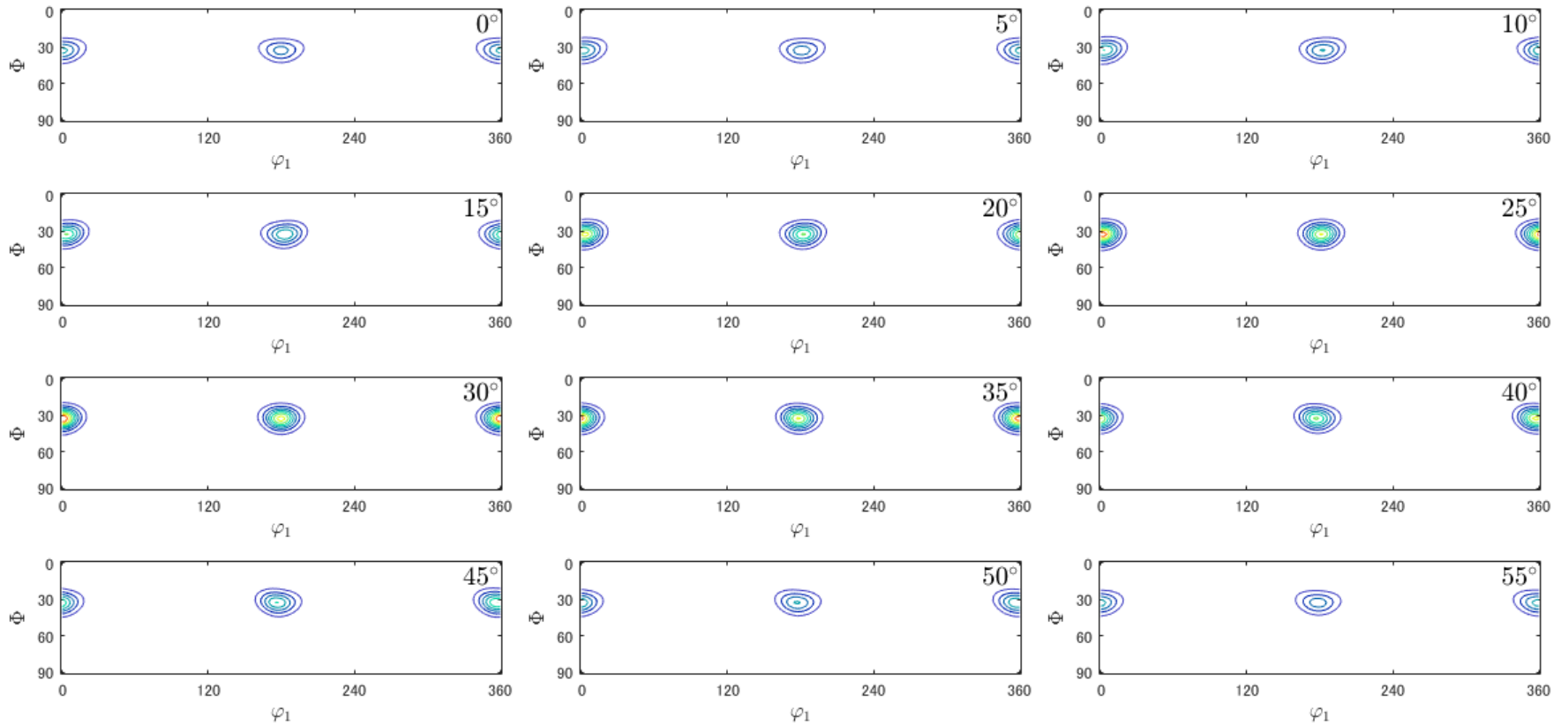


```
>> odf=calcODF(pf)
```

ワークスペース	
名前 ▲	値
CS	12x2 crystalSymmetry
fname	1x3 cell
h	1x3 cell
odf	1x1 ODF
pf	73x48 PoleFigure
pname	'C:¥CTR¥DATA¥Mg-TD-split¥15-90¥RE
SS	1x1 specimenSymmetry

# MTEX(ODF図表示)

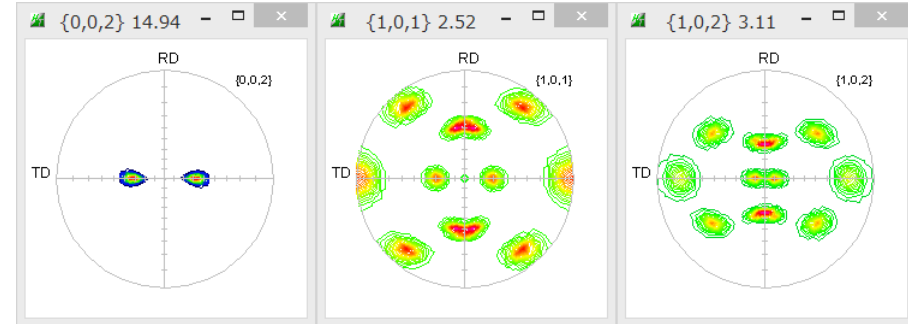
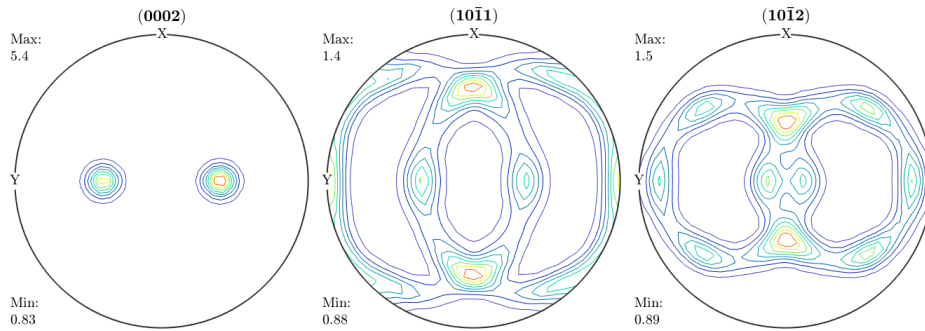
```
>> plot(odf, 'contour', 'sections', 12)
```



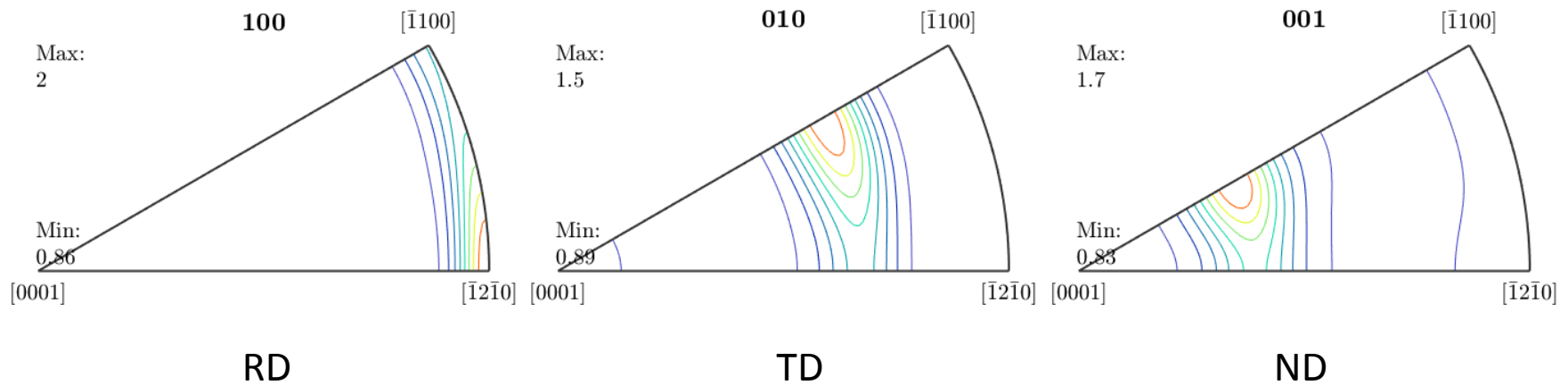
$\psi_1=360$ データなし、 $\psi_2=60$ データなし

# MTEX(再計算極点図)

```
>> rpf=calcPoleFigure(odf,h)
>> plot(rpf,'contour')
```



```
>> r=[xvector,yvector,zvector]
>> plotIPDF(odf,r,'contour')
```



注意: 極点図、逆極点図は、等角度で表示されている、  
一般的には、等面積表示である。

# MTEX (ODF図, 再計算極点図、逆極点図のExport)

## ODF図のExport

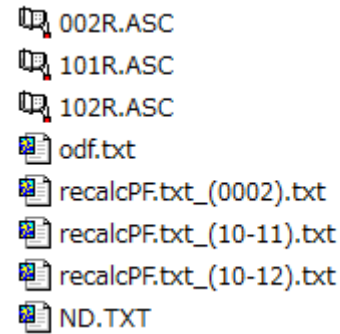
```
>> export(odf, 'odf.txt')
```

## 再計算極点図のExport

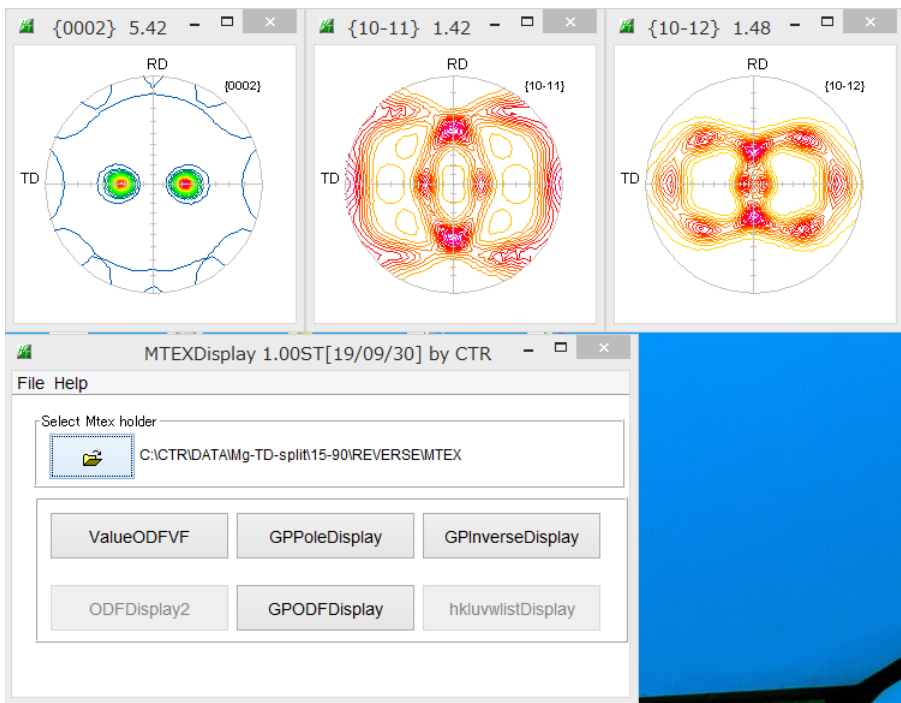
```
>> export(rpf, 'recalcPF.txt')
```

## ND逆極点図のExport

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



## ODFPoleFigure1.5(2)->ODFAfterTools->MTEXDisplay



MTEXのホルダ選択で再計算極点図が表示

MTEXホルダにworkホルダが作成され  
表示用極点図(先頭が指数)が作成

> 15-90 > REVERSE > MTEX > work

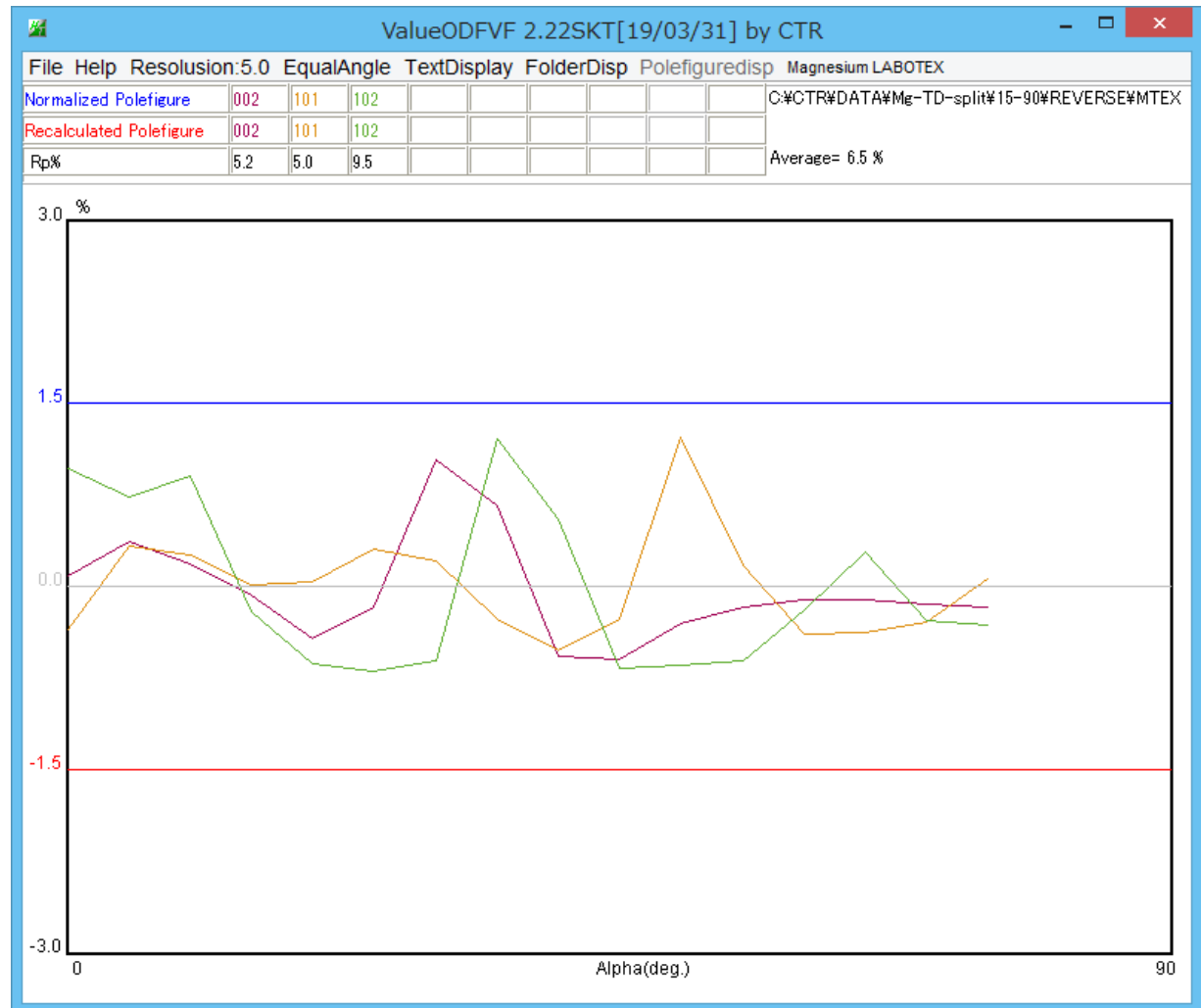
名前	更新日時	種類	サイズ
0002rpole_2.TXT	2019/02/11 16:20	テキスト文書	31 KB
10-11rpole_2.TXT	2019/02/11 16:20	テキスト文書	30 KB
10-12rpole_2.TXT	2019/02/11 16:20	テキスト文書	30 KB

# CTRソフトウェアでMTEXのError評価

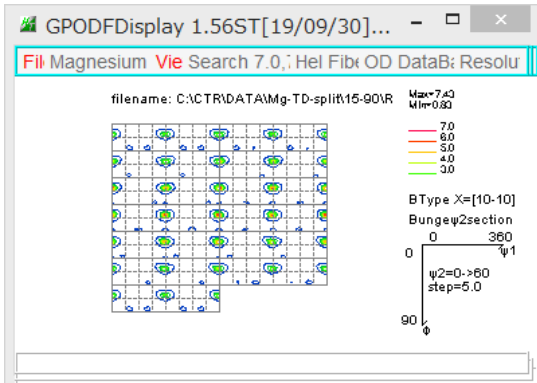
ValueODFVF

ValueODFVF Ver2.34以降は4指数のまま解析可能2019/02/11

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

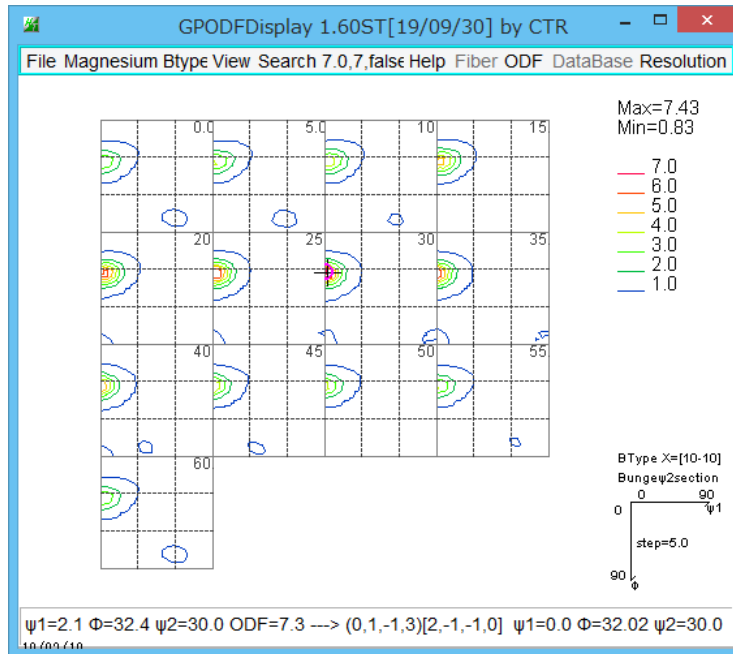


Rp%が±1.5%以内で良好



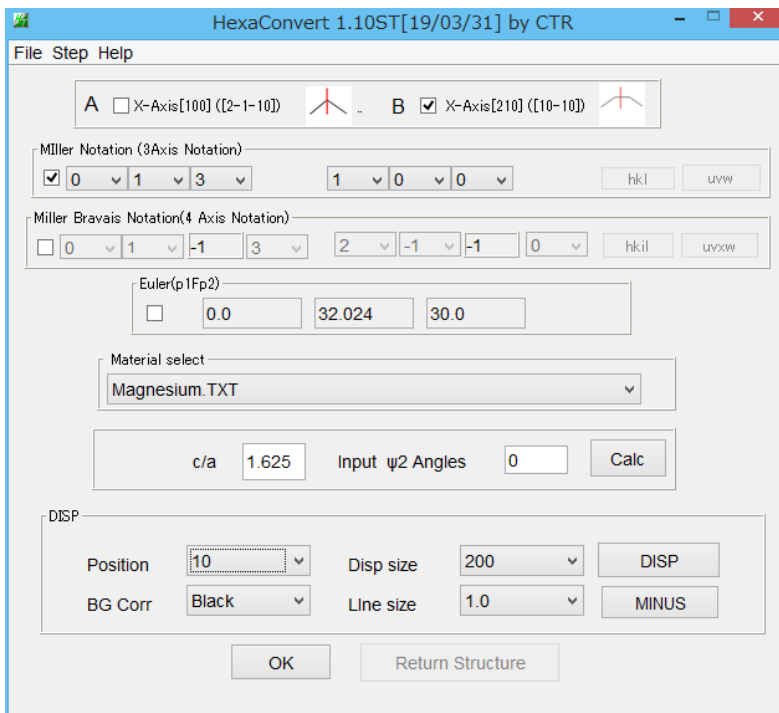
Triclinic->Orthorombic

MTEX(Triclinic(1/4) to Orthorombic)



非対称ODF図から1/4極点図を取得

3指数<->4指数変換



$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ i \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c/a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sin \phi_2 \sin \phi \\ \cos \phi_2 \sin \phi \\ \cos \phi \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ t \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & a/c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi \\ -\cos \phi_1 \sin \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi \\ \sin \phi_1 \sin \phi \end{bmatrix}$$

Direction <uvw> to <UVTW>

$$\begin{aligned} U &= (2u-v)/3 \\ V &= (2v-u)/3 \\ T &= -(u+v)/3 \\ W &= w \end{aligned}$$

for example:  
<100> is equal <2-1-10>.  
<210> is equal <10-10>.

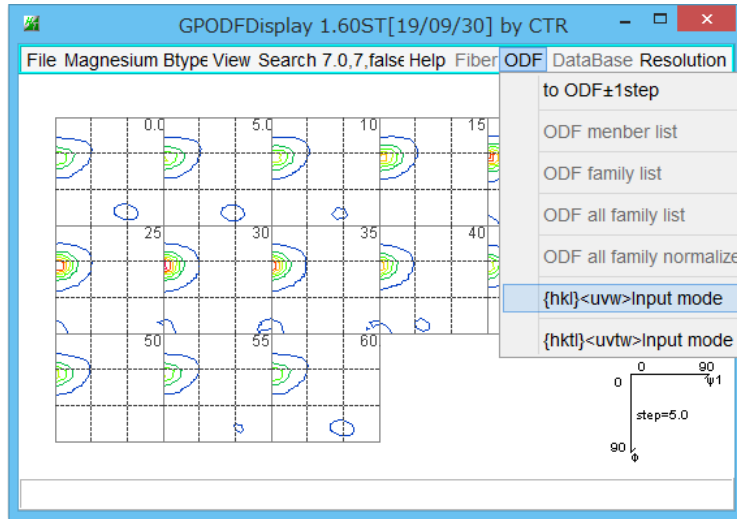
Plane {uvw} to {UVTW} :

$$\begin{aligned} U &= u \\ V &= v \\ T &= -(u+v) \\ w &= W \end{aligned}$$

for example:  
{2-10} is equal {2-1-10};  
{10-10} is equal {100}.

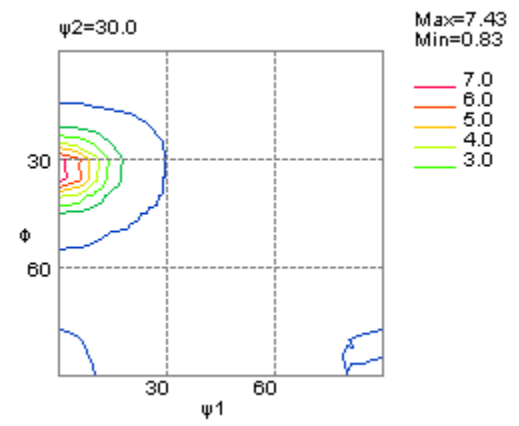


# CTRでMgの方位解析

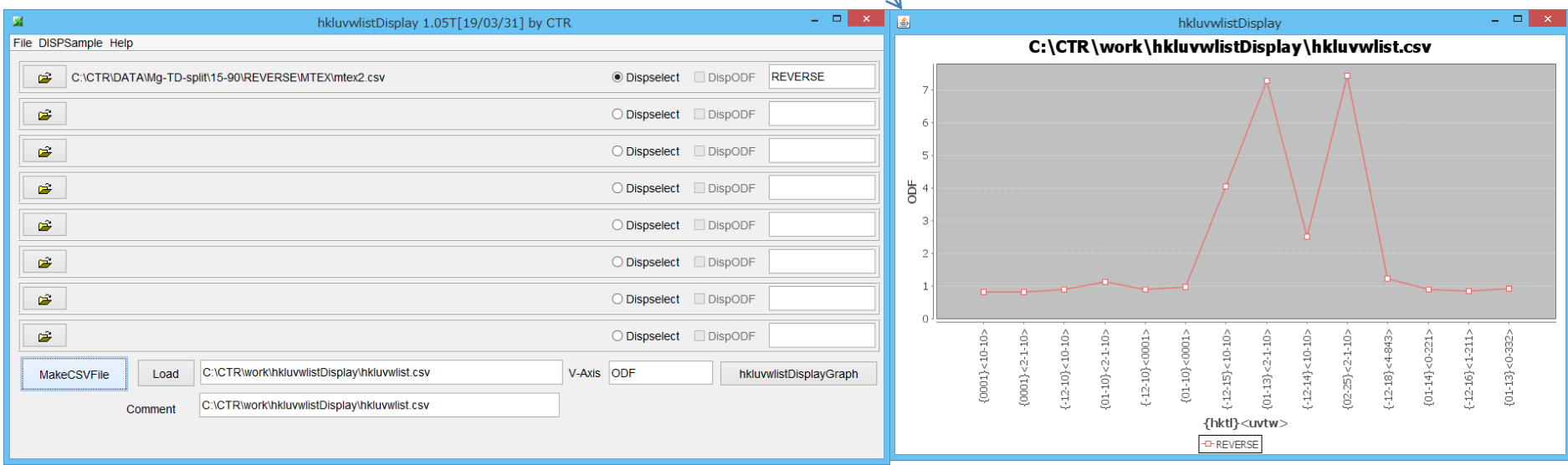


```

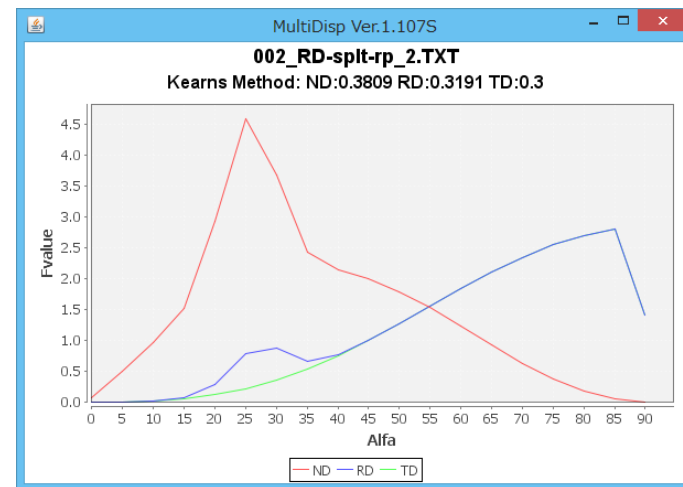
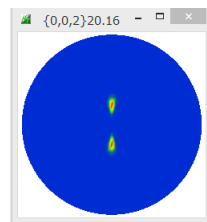
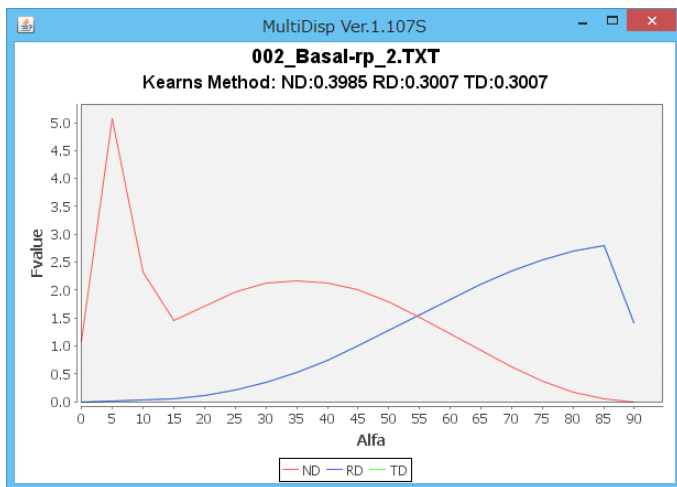
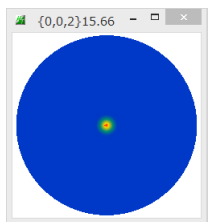
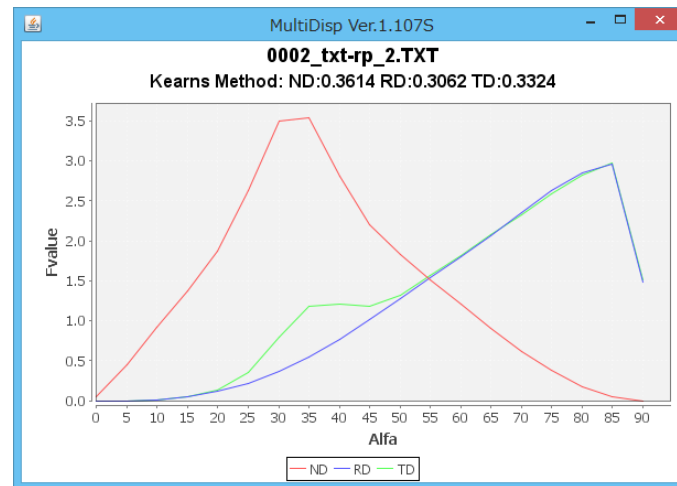
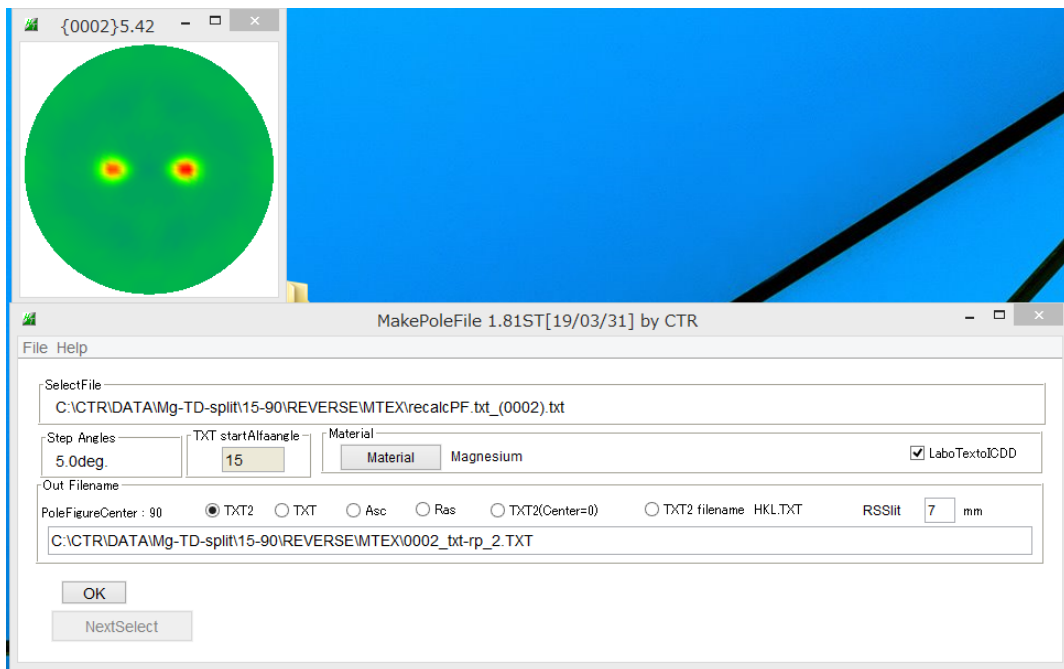
{hkt1}<uvw>,mtex2
{0001}<10-10>,0.83
{0001}<2-1-10>,0.83
{-12-10}<10-10>,0.9
{01-10}<2-1-10>,1.14
{-12-10}<0001>,0.9
{01-10}<0001>,0.98
{-12-15}<10-10>,4.04
{01-13}<2-1-10>,7.29
{-12-14}<10-10>,2.51
{02-25}<2-1-10>,7.43
{-12-18}<4-843>,1.23
{01-14}<0-221>,0.91
{-12-16}<1-211>,0.86
{01-13}<0-332>,0.93
    
```



複数の解析結果の比較が可能

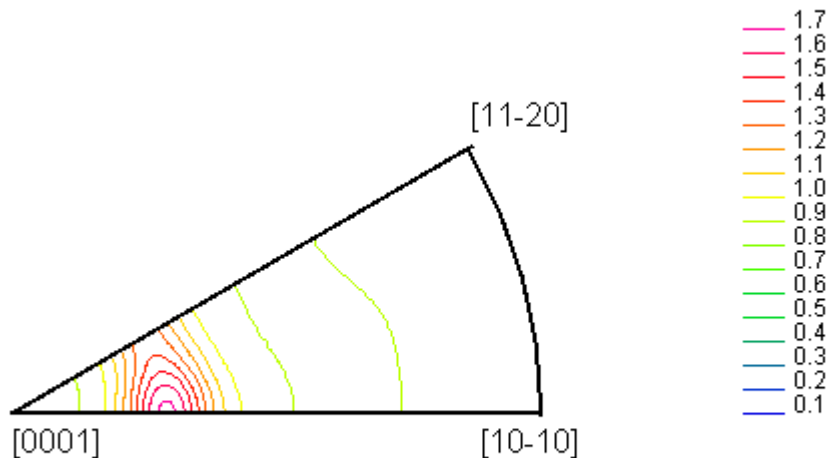


# CTRソフトウェアで再計算極点図解析(配向関数)

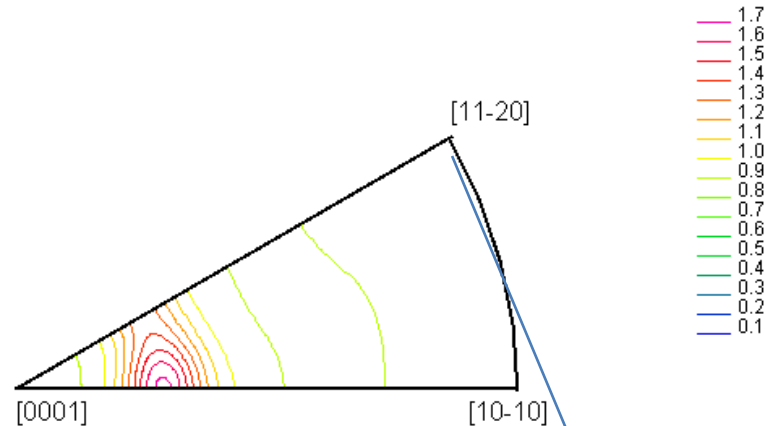


# CTRソフトウェアで逆極点図解析

C:\CTR\DATA\Mg-TD-split15-90\REVERSE\MTEX\Inverselist.TXT  
 null ND-Plane Max=1.73 Min=0.0



C:\CTR\DATA\Mg-TD-split15-90\REVERSE\MTEX\Inverselist.TXT  
 null ND-Direction Max=1.73 Min=0.0



( $\phi=32.5$   $\beta=30.9$ )  $Z=1.73 \rightarrow [1,0,-1,2]$

( $\phi=32.9$   $\beta=32.3$ )  $Z=1.72 \rightarrow (1,0,-1,3)$

逆極点Plane<->Direction

File Help

Max index: 15

Method: Plane

Material: Magnesium.txt

$\phi$ : 32.02  $\beta$ : 30.0   Center[001]

32.02 30.0  $\rightarrow (1\ 0\ 3) \rightarrow (1\ 0\ -1\ 3)$

Plane

h: 1 k: 0 l: 3

h: 1 k: 0 t: -1 l: 3

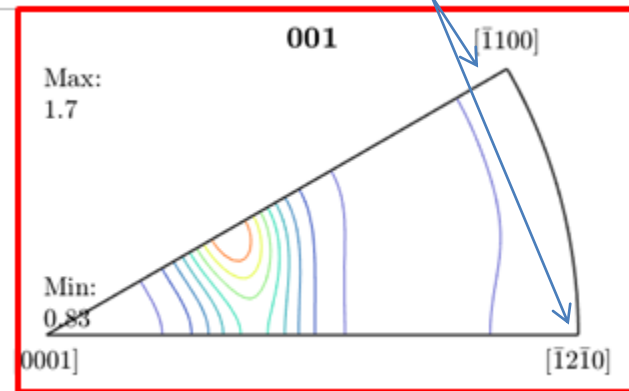
Direction

Max index: 15 32.02 30.0  $\rightarrow [2\ 1\ 2]$

32.02 30.0  $\rightarrow [1\ 0\ -1\ 2]$

Inverse center: (0 0 1)

MTEXの逆極点表示



軸が異なる[11-20]->[-1100]

# 最後に

MTEXでHexagonal計算は他の資料も参考にしてください。

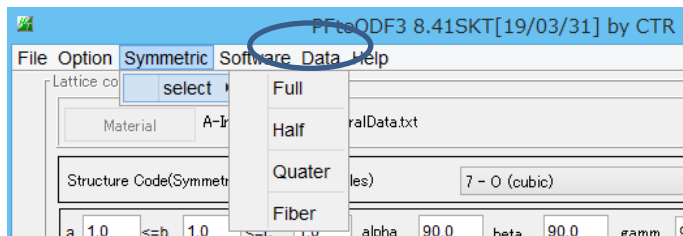


HelperTex officeサイトの第2技術資料を参照して下さい。

日時	資料
2019/02/11	<a href="#">Mg合金をMTEXで解析の説明資料2</a>
2019/02/03	<a href="#">Cubic-Harmonicリスト-MTEX-StandardODF-poolA</a>
2019/02/02	<a href="#">Mg-TD-Splitの方位密度が高い場合の<math>\alpha</math>範囲と方位密度</a>
2019/02/02	<a href="#">Mg-TD-Splitの方位密度が低い場合の<math>\alpha</math>範囲と方位密度</a>
2019/01/30	<a href="#">Mg-TD-split: LaboTex-TeXTools-MTEX比較</a>
2019/01/29	<a href="#">Mg-FWHM=20deg-TD-splitのLaboTex, MTEX比較</a>
2019/01/27	<a href="#"><math>\alpha</math>範囲によるODF方位密度をMTEX-LaboTexで比較</a>
2019/01/27	<a href="#">Mg-TD-splitのLaboTexとMTEXを比較</a>
2019/01/27	<a href="#">MTEXによるTD-Split方位のシミュレーション</a>
2019/01/26	<a href="#">Mg合金をMTEXで解析の説明資料</a>

本資料

極点図からMTEXでODF解析する場合、1/4対称で解析する場合、PFtoODF3でhalf処理を行う



1/4対称ODF図を得るにはODFをExportし、GPODFDisplayでOrthorombic図を計算する

MTEX(f1 F f2 Value)	
MTEX(Triclinic(1/4) to Orthorombic)	(Hexa BType ) or Other
MTEX(Triclinic to Orthorombic)	(Hexa BType) to (Hexa AType)

Triclinicで使用  
Orthorombicで使用  
使用しない