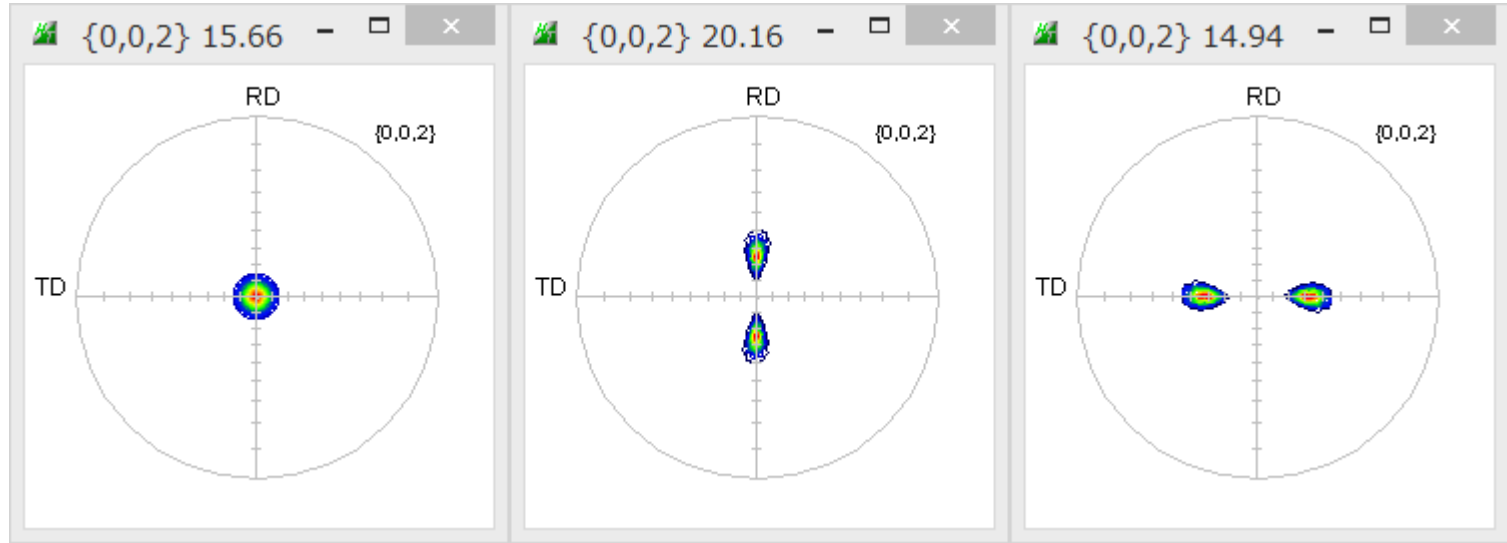


Mg合金をMTEXで解析



Basal

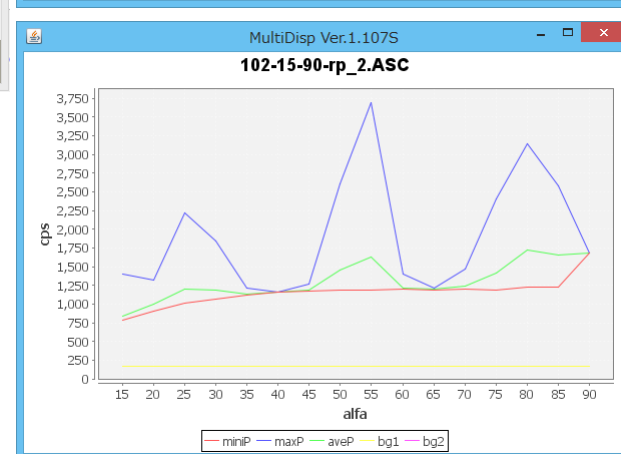
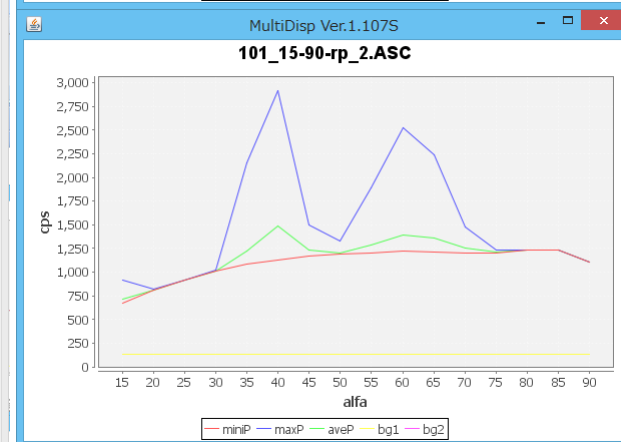
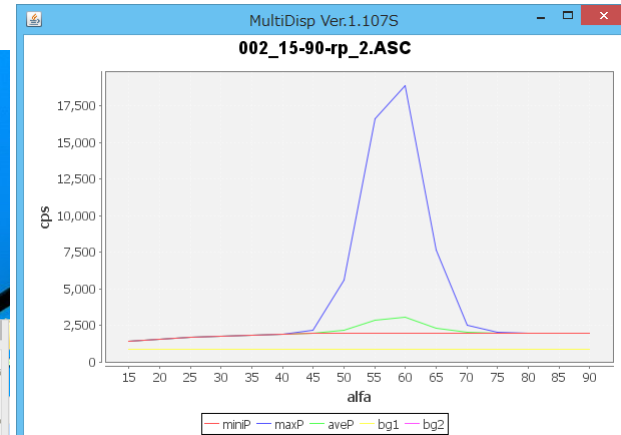
RD-split

TD-split

バックグラウンド

The screenshot shows the ODFPoleFigure2 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 with the following settings:

- Files select:** ASC(RINT-PC), 002_15-90-rp_2_ASC, 101_15-90-rp_2_ASC, 102-15-90-rp_2_ASC
- Calculation Condition:** C:\CTR\DATA\Mg-TD-split\5-90\REVERSE\002_15-90-rp_2_ASC, hkl: 0.0,2
- Background delete mode:** DoubleMode, BG defocus: DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm
- Smoothing:** +d 3, Arithmetic mean
- AbsCalc:** Ref, Trans, Schulz reflection method, Absorption coefficient: 300.0, Thickness: 0.1, 2Theta: 34.404
- Defocus file Select:** Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus), DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm
- Smoothing for ADC:** Cycles: 2, Weight: 10
- Normalization:** CTR, Connect, CenterData: Average, OutFiles: Asc, MTEsc, Ras, TXT, TXT2



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 structure showing "BGMode Measure" and "Cond" options. The "Measure" option is highlighted.

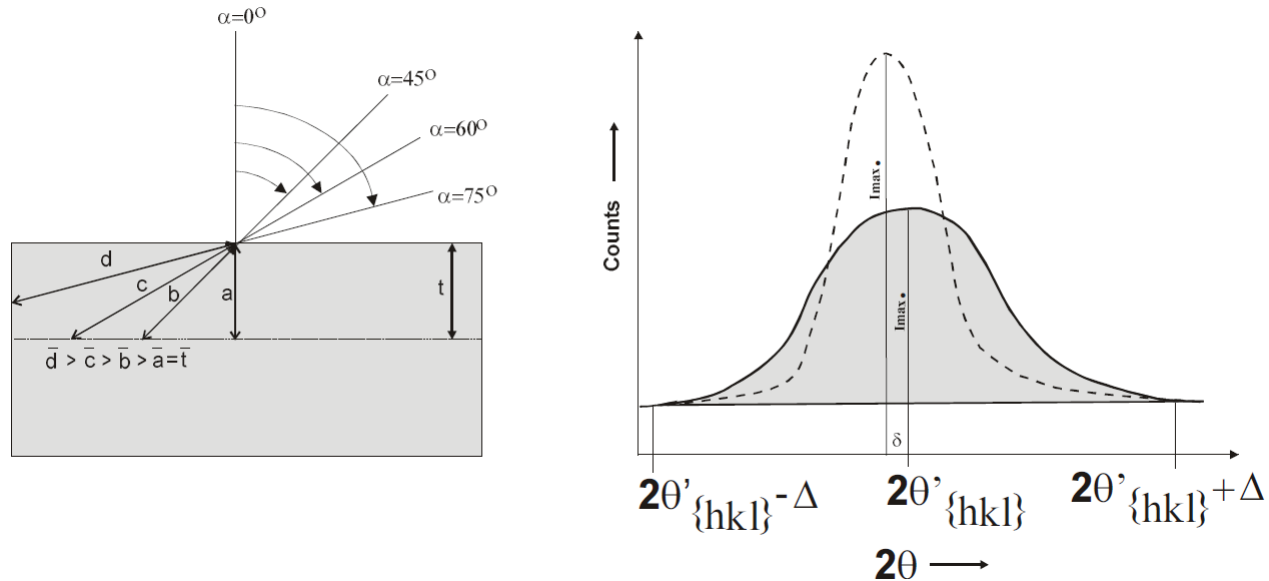
- BGMode Measure
- Cond
- Measure
- Straight(Optional)
- Defocus(Optional)
- Measure(Calc)
- Minimum
- All background

ToolKit->SoftWare->Pagenext

PoleBackgroundEditor

Defocus

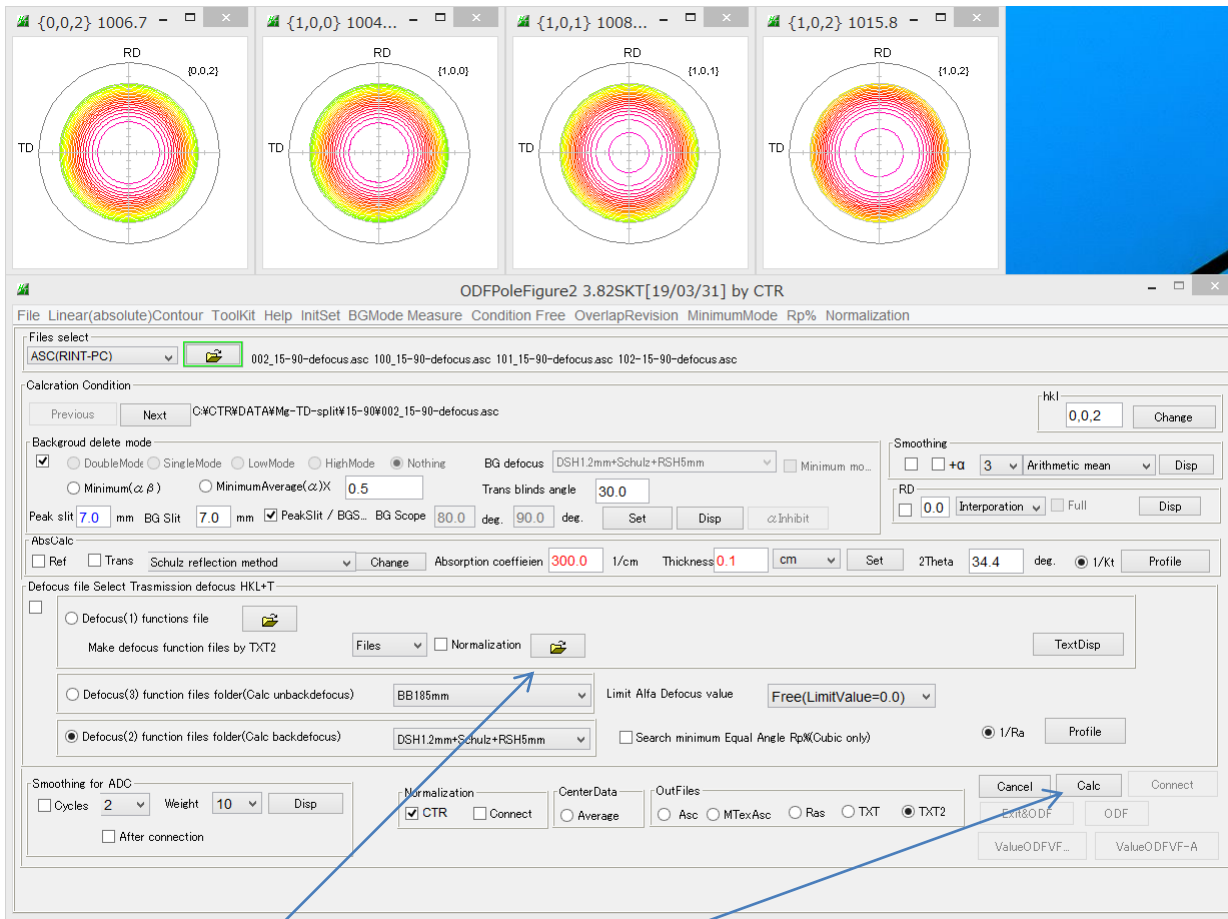
XRDで極点測定を行うと, defocusにより回折線が広がり、極点図の外周向け強度が低下する



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

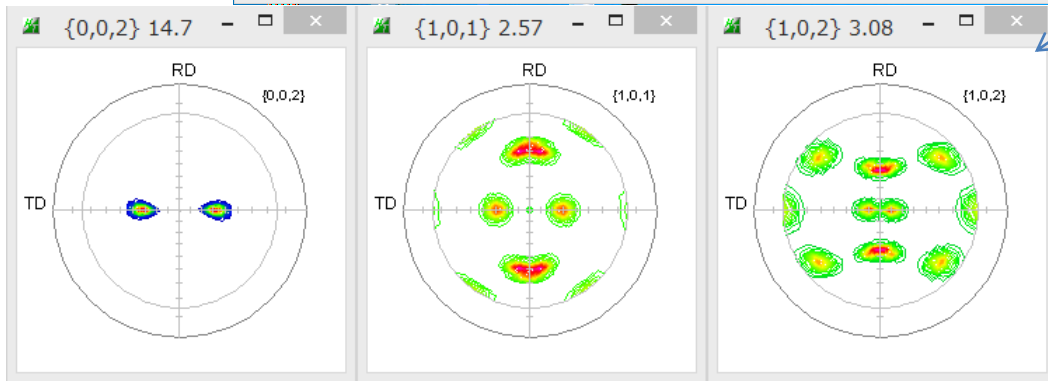
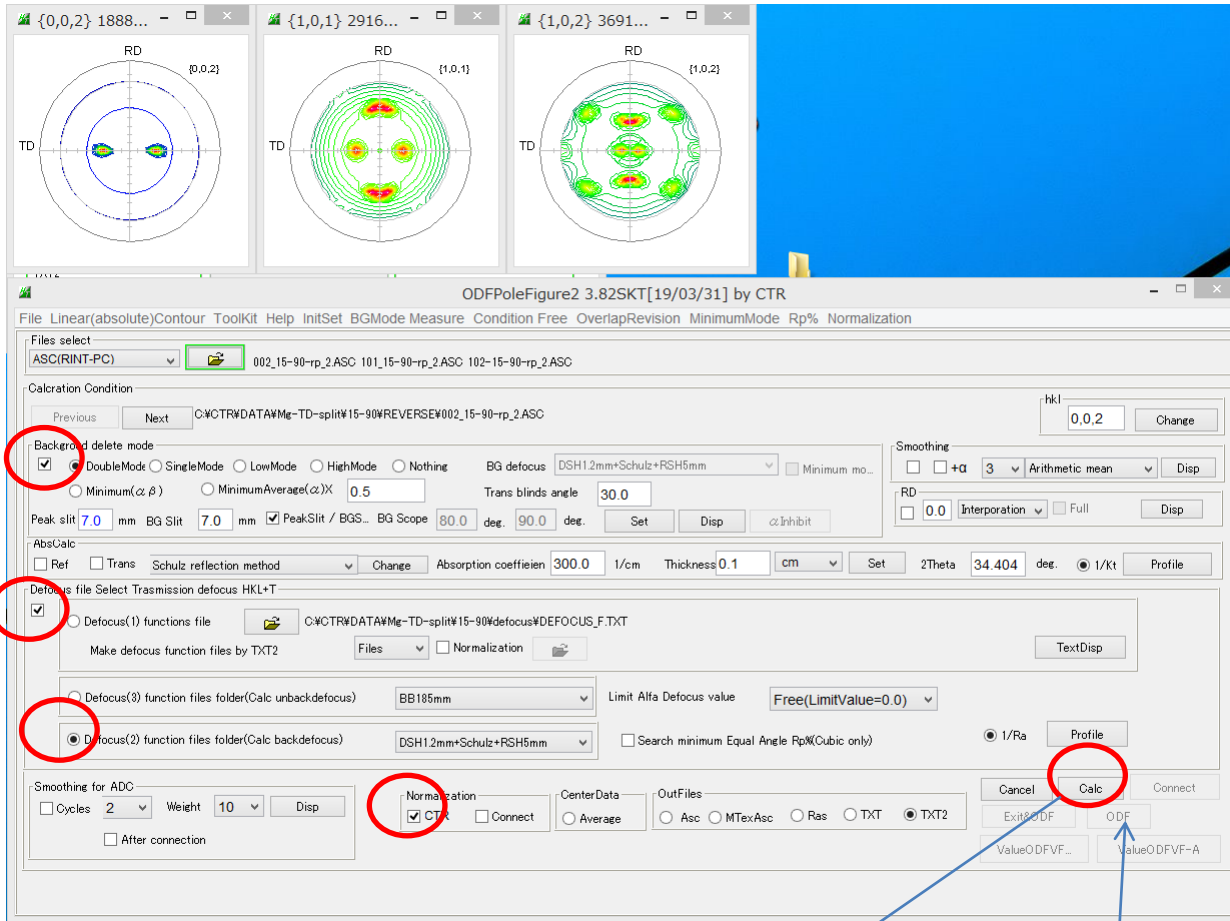
この補正に無配向試料で補正する。

Defocus補正 (defocusTABLE) 作成



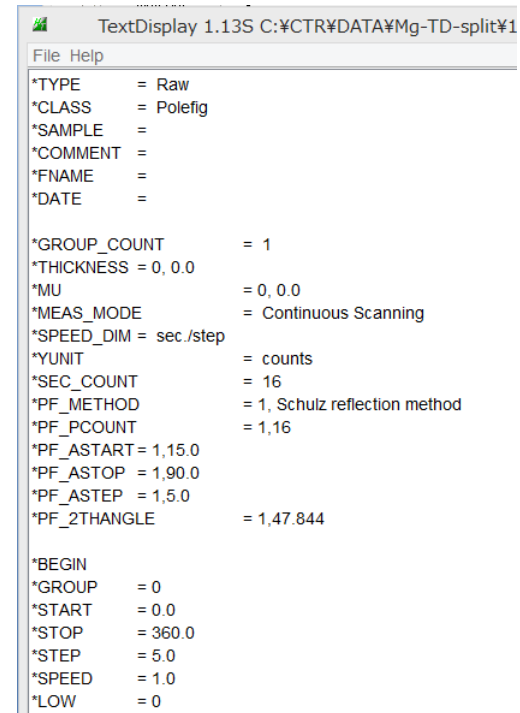
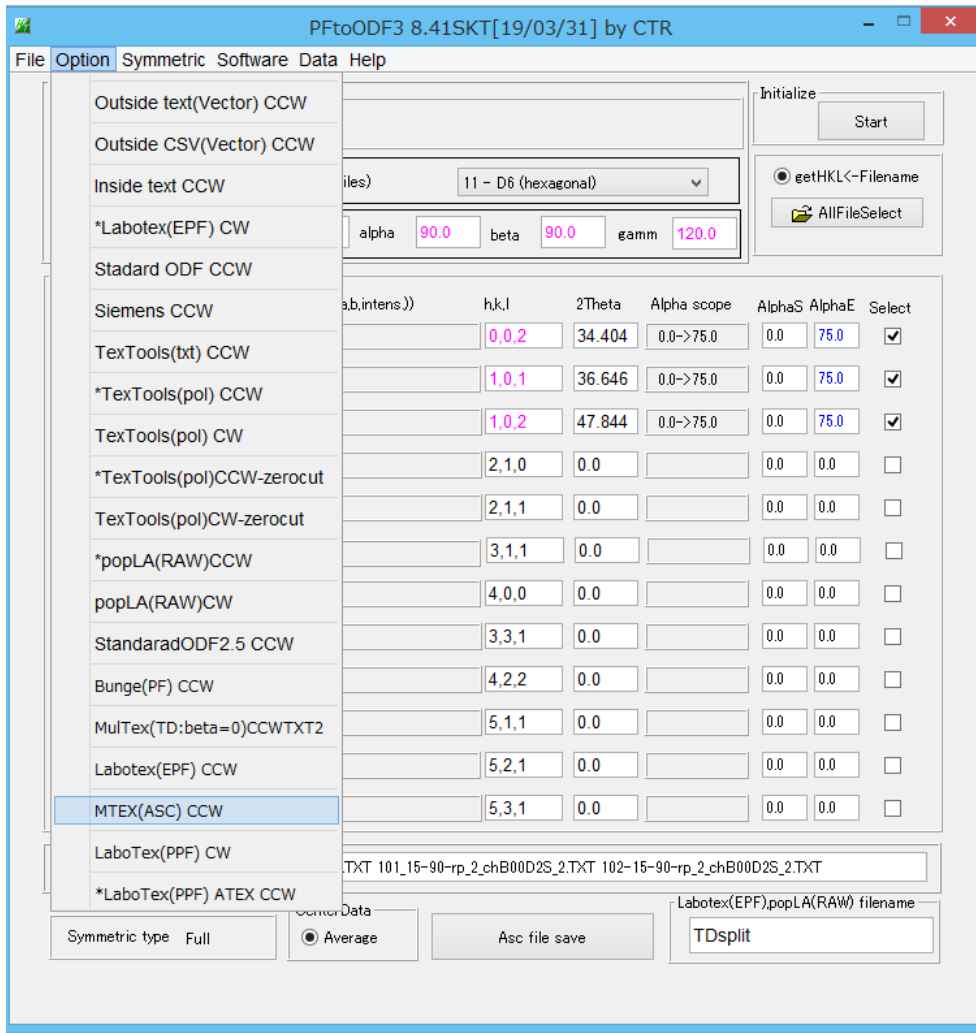
バックグラウンド削除し、CalcでTXT2ファイル作成
TXT2を選択し、TABLE作成する。

内部defocusTABLEで補正

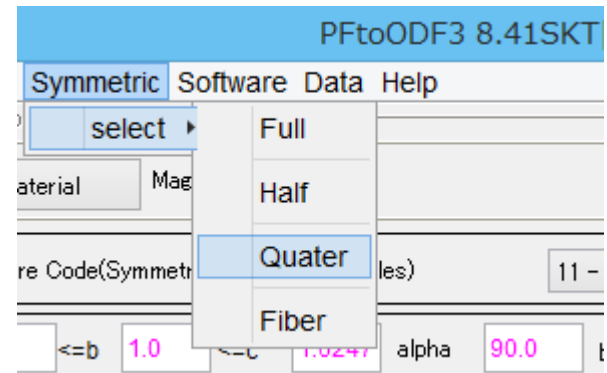


外周付近の密度がアップします。
ODFでMTEX向けデータ作成

MTEX入力データ作成



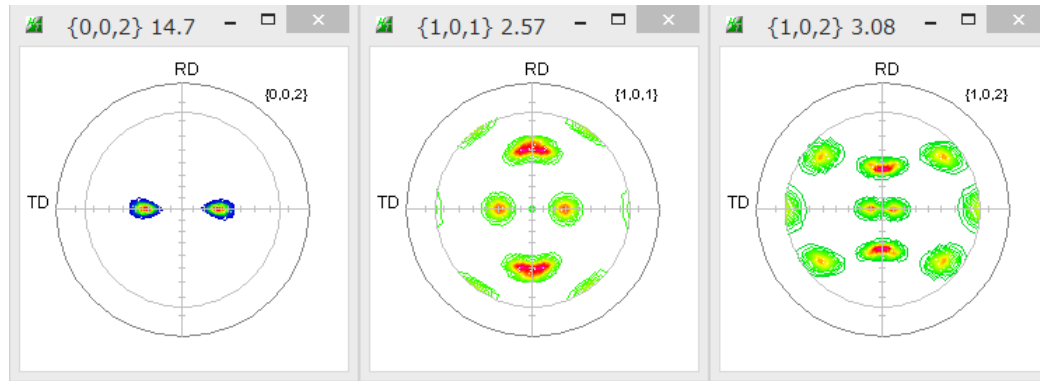
Triclinic→Orthorombic



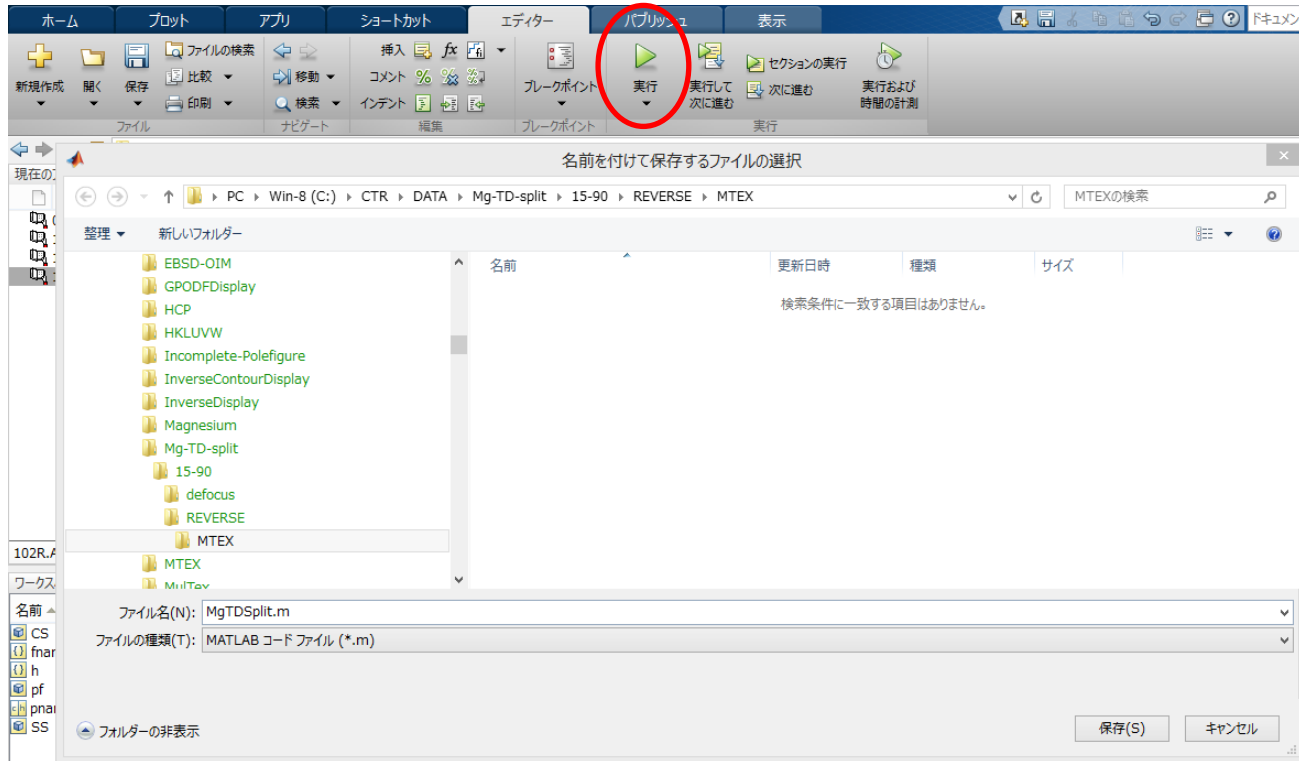
MTEX

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 (Mファイル作成し、データ読み込み)

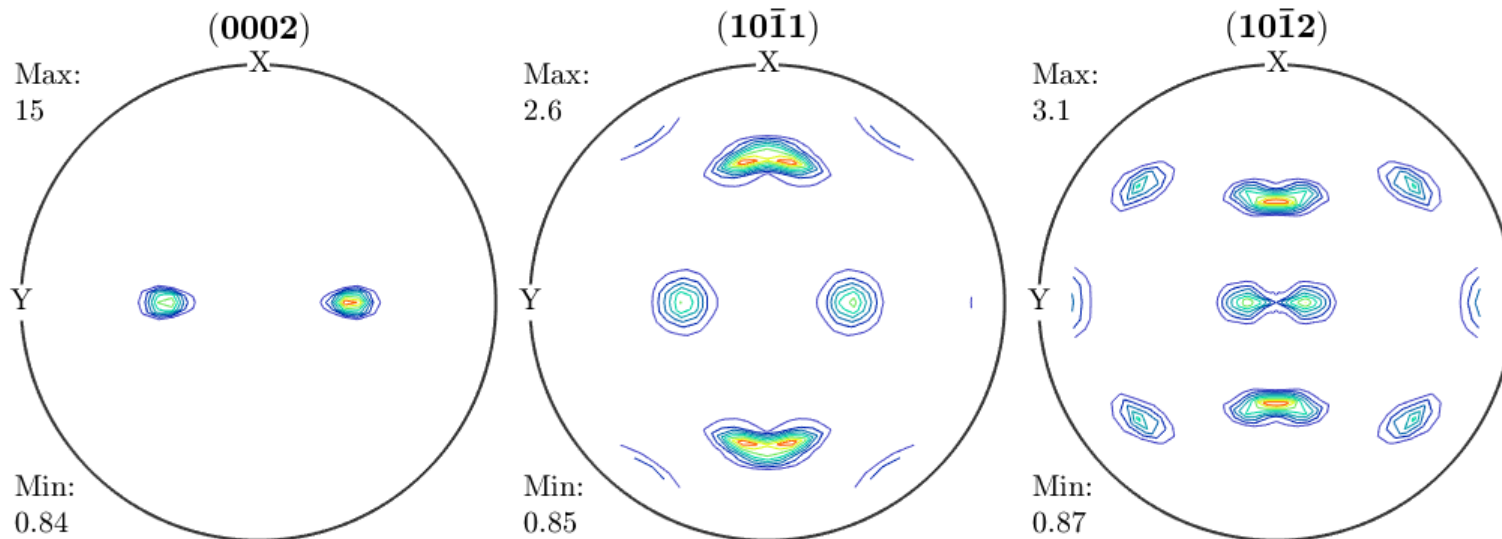


極点図が読み込まれる。

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')
```

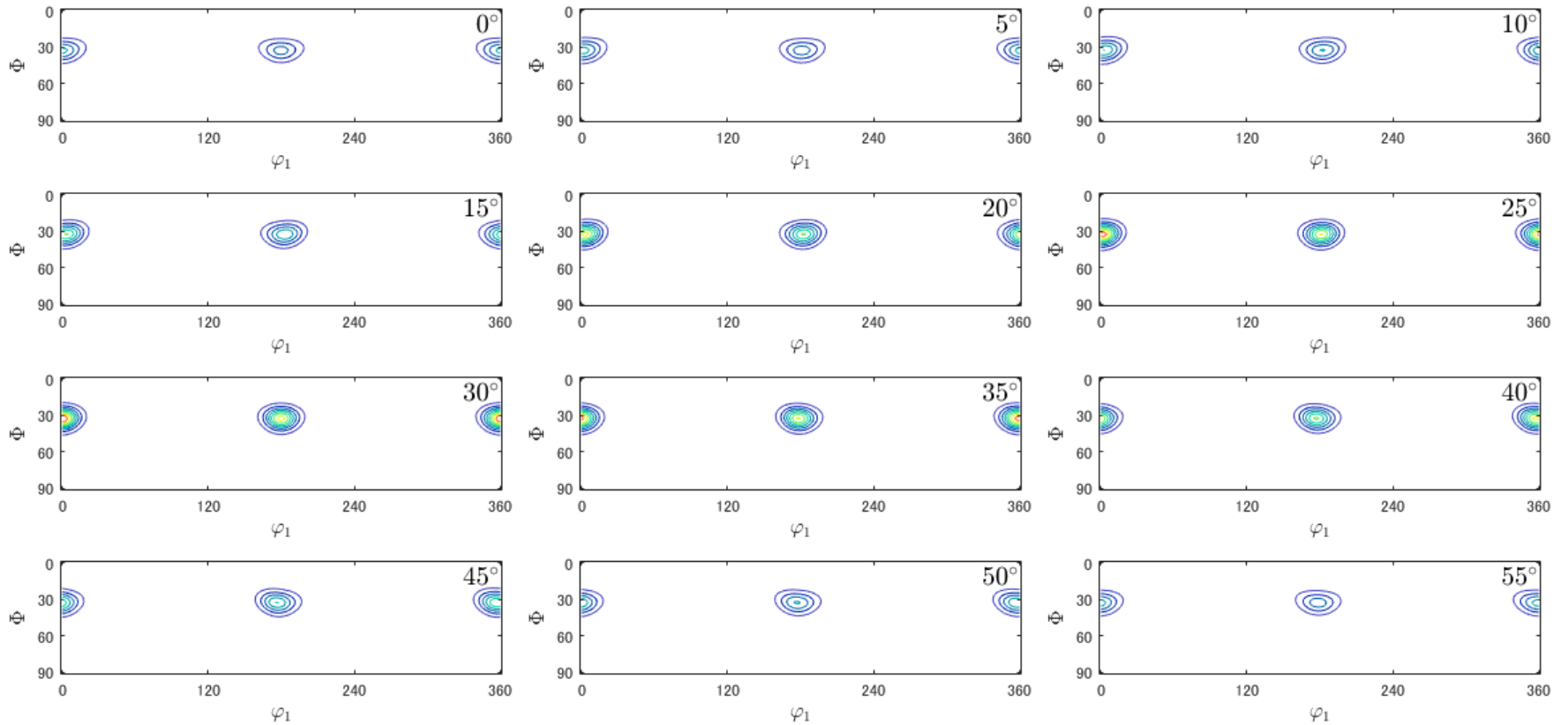


```
>> odf=calcODF(pf)
```

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)

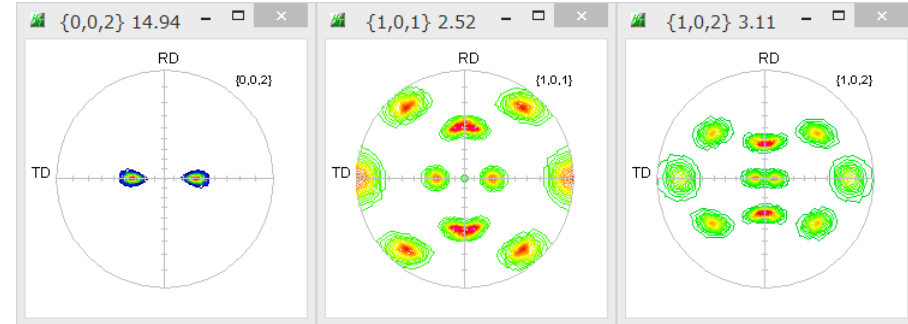
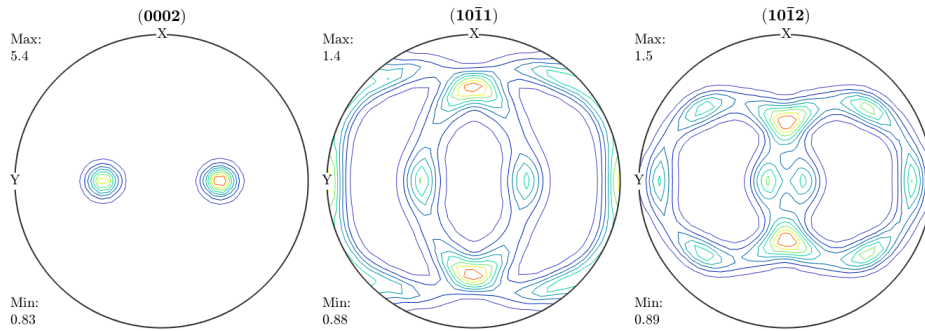
```
>> plot(odf, 'contour', 'sections', 12)
```



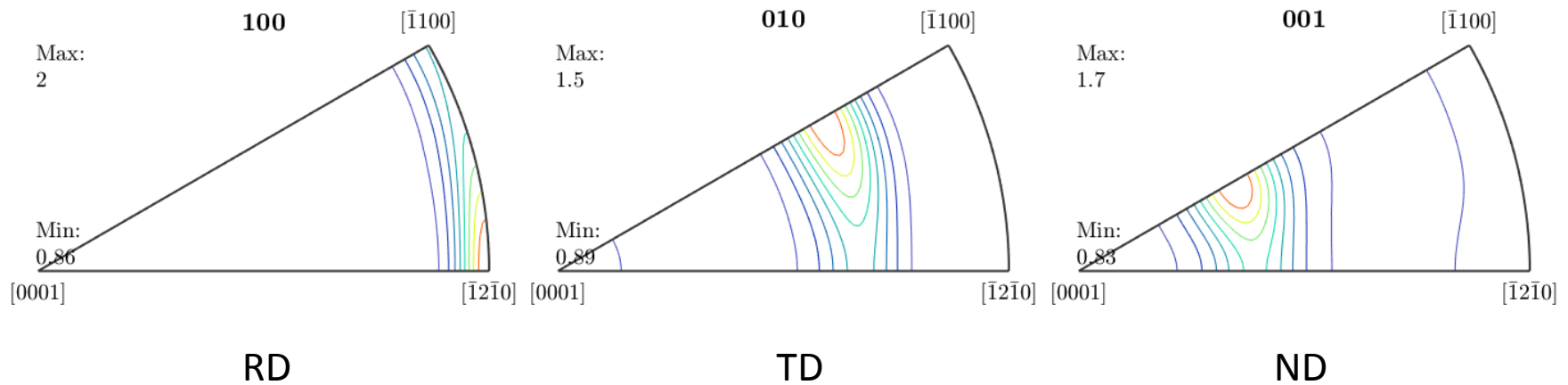
$\psi_1=360$ データなし、 $\psi_2=60$ データなし

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

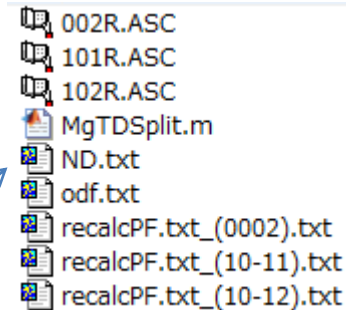
```
>> export(odf, 'odf.txt')
```

再計算極点図のExport

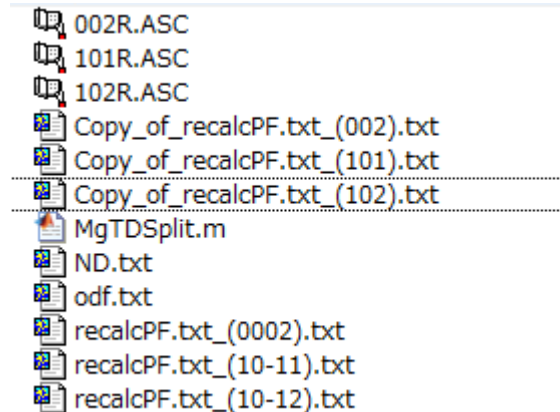
```
>> export(rpf, 'recalcPF.txt')
```

ND逆極点図のExport

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



再計算極点図をcopyし、の4指数を3指数に変える



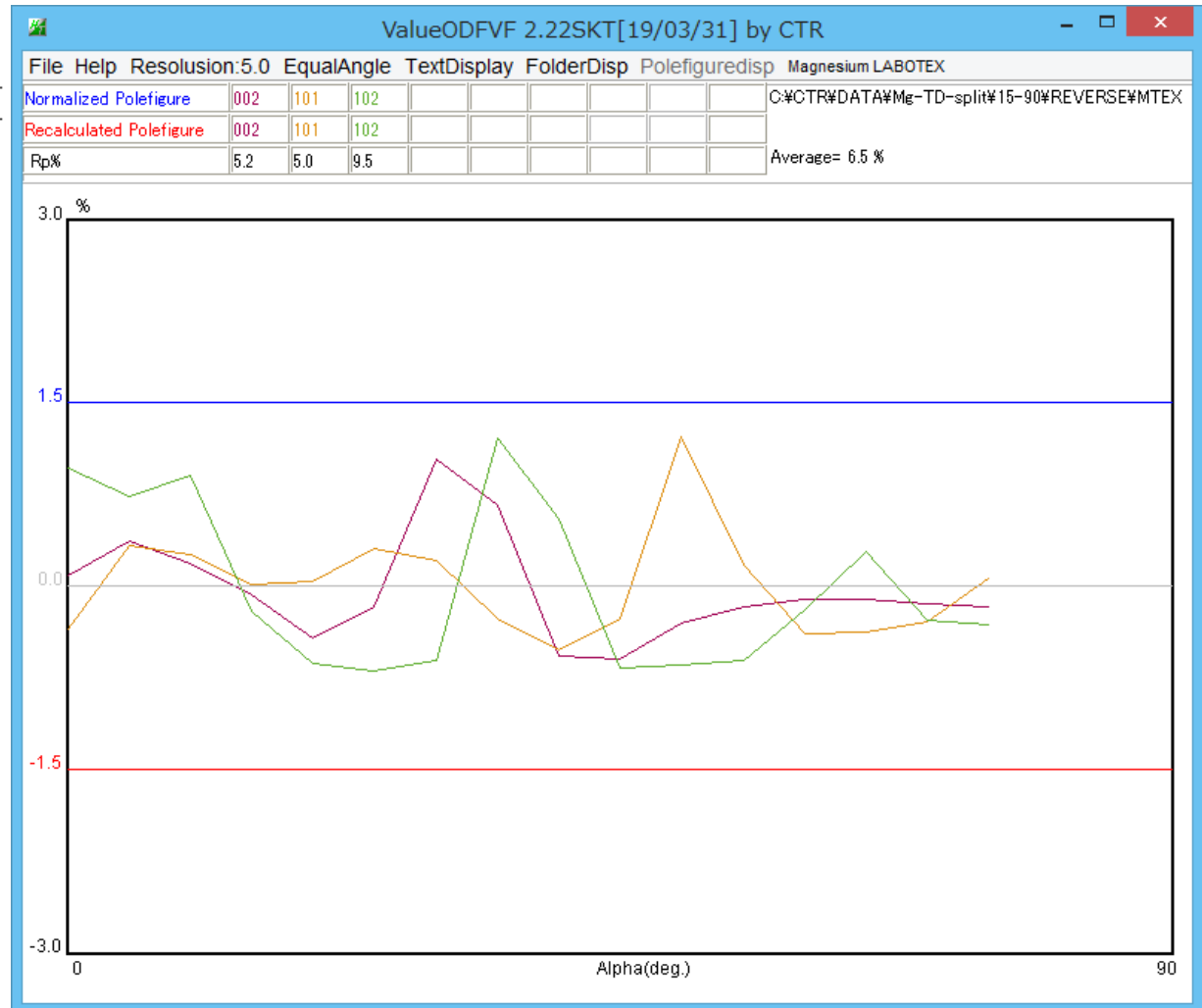
MTEXDisplayから再計算極点図を表示する場合、copy必要なし 2019/02/11

CTRソフトウェアでMTEXのError評価

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

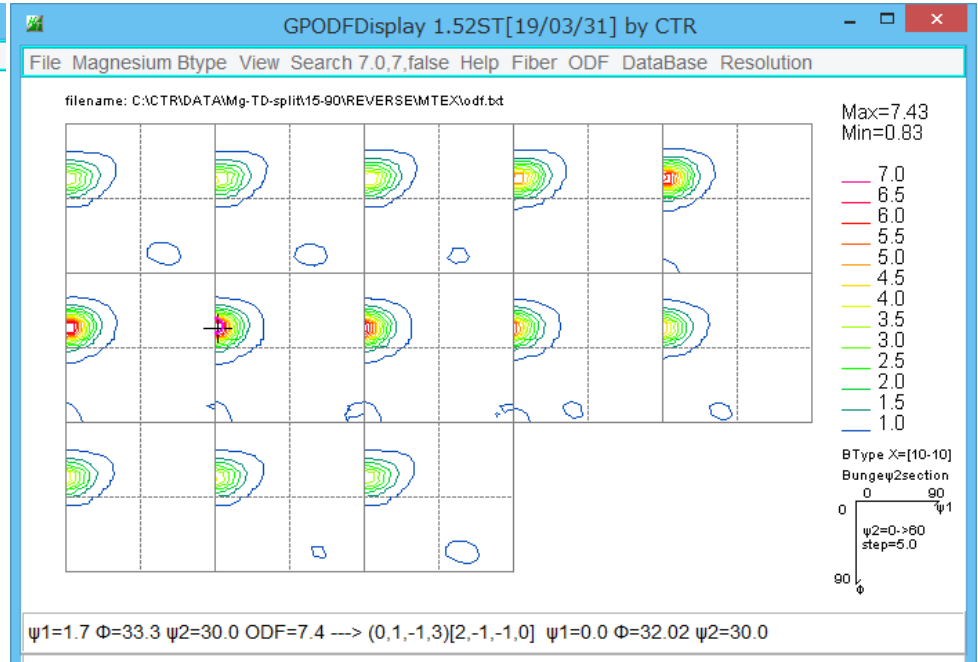
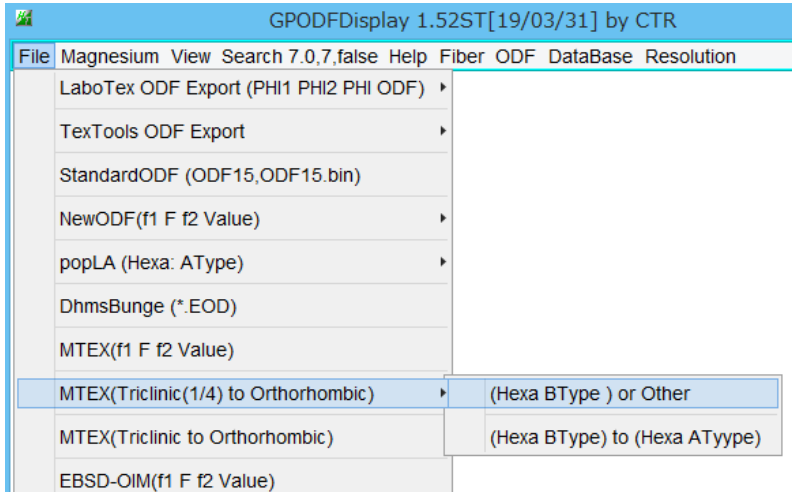
- 002R.ASC
- 101R.ASC
- 102R.ASC
- Copy_of_recalcPF.txt_(002).txt
- Copy_of_recalcPF.txt_(101).txt
- Copy_of_recalcPF.txt_(102).txt
- MgTDSplit.m
- ND.txt
- odf.txt
- recalcPF.txt_(0002).txt
- recalcPF.txt_(10-11).txt
- recalcPF.txt_(10-12).txt

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

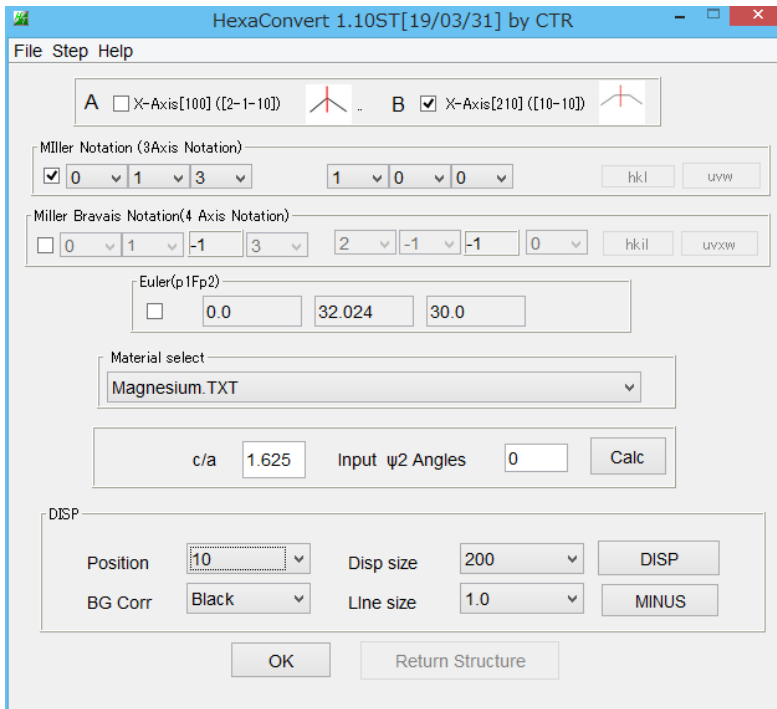


Rp%が±1.5%以内で良好

CTRでODF解析



3指数<->4指数変換



Direction <uvw> to <UVTW>

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

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

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

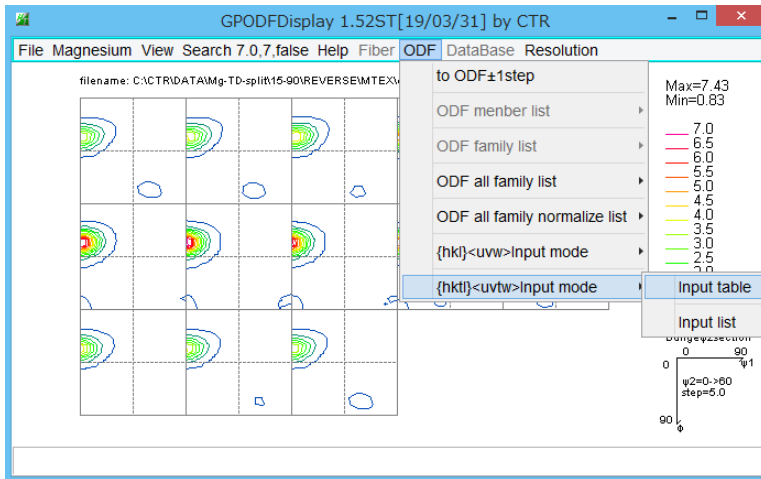
$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ t \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & a/c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi \\ -\cos \phi_1 \sin \phi_2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

Plane {uvw} to {UVTW} :

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

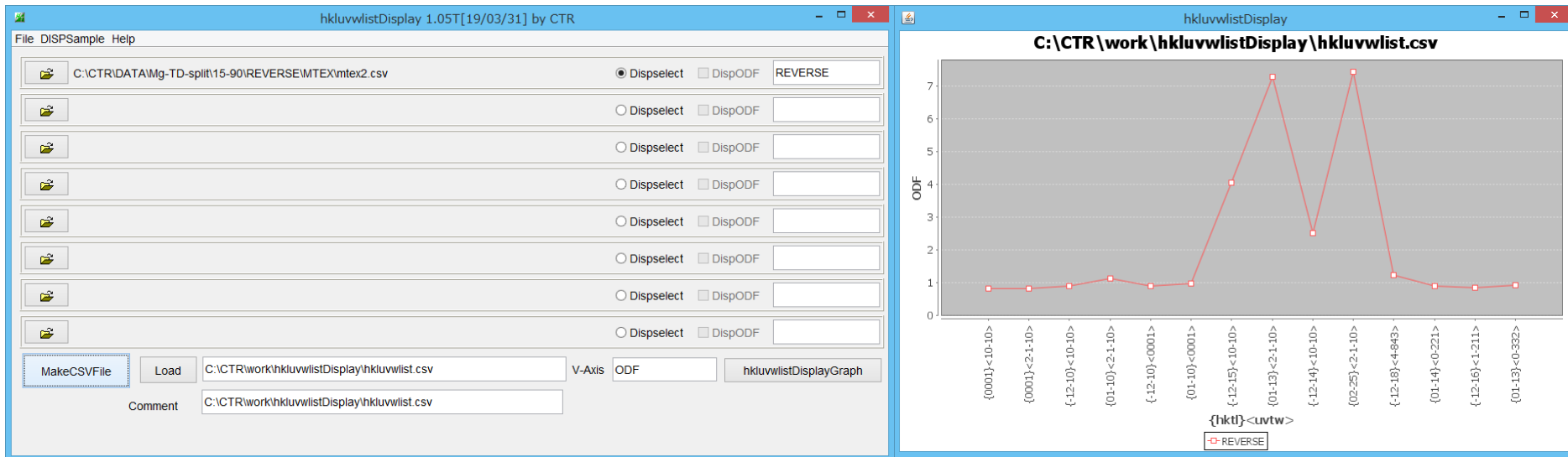
for example:
 {2-10} is equal {2-1-10};
 {10-10} is equal {100}.

CTRでMgの方位解析

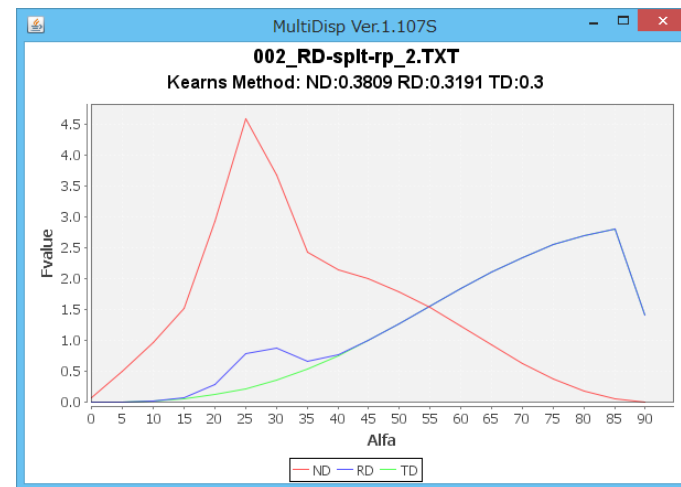
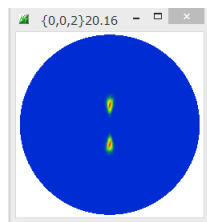
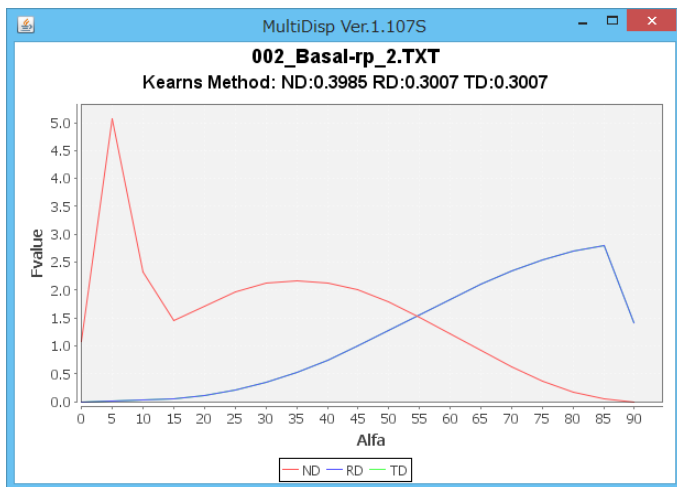
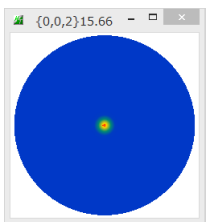
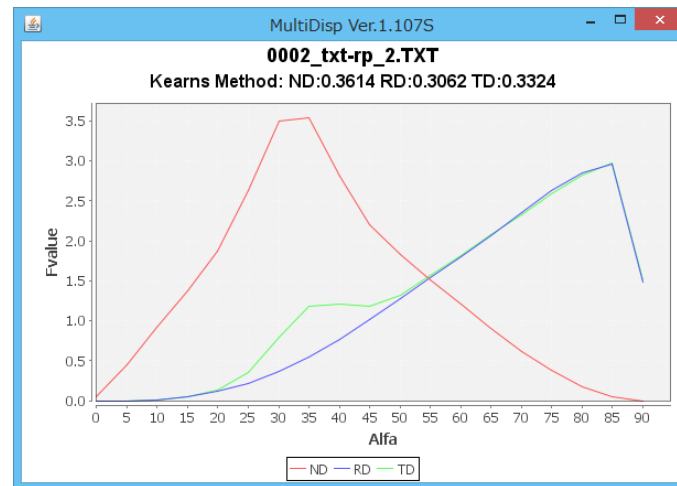
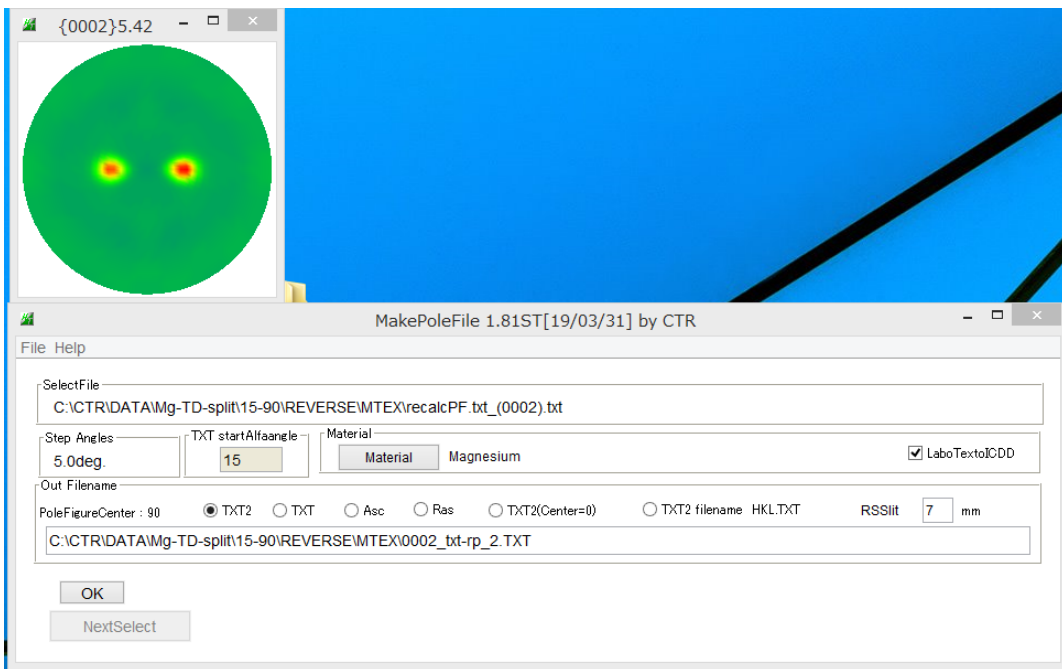


```
{hkl}<uvw>,mtex2
{0001}<10-10>,0.83
{0001}<2-1-10>,0.83
{-12-10}<10-10>,0.9
{01-10}<2-1-10>,1.14
{-12-10}<0001>,0.9
{01-10}<0001>,0.98
{-12-15}<10-10>,4.04
{01-13}<2-1-10>,7.29
{-12-14}<10-10>,2.51
{02-25}<2-1-10>,7.43
{-12-18}<4-843>,1.23
{01-14}<0-221>,0.91
{-12-16}<1-211>,0.86
{01-13}<0-332>,0.93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

複数の解析結果の比較が可能

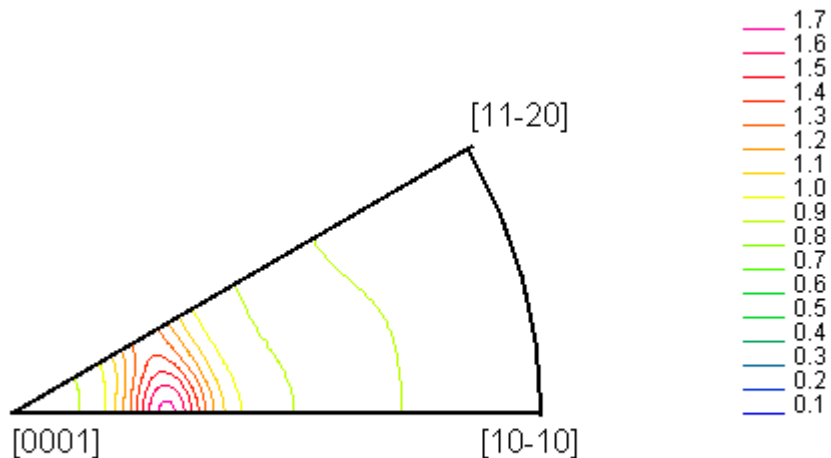


CTRソフトウェアで再計算極点図解析

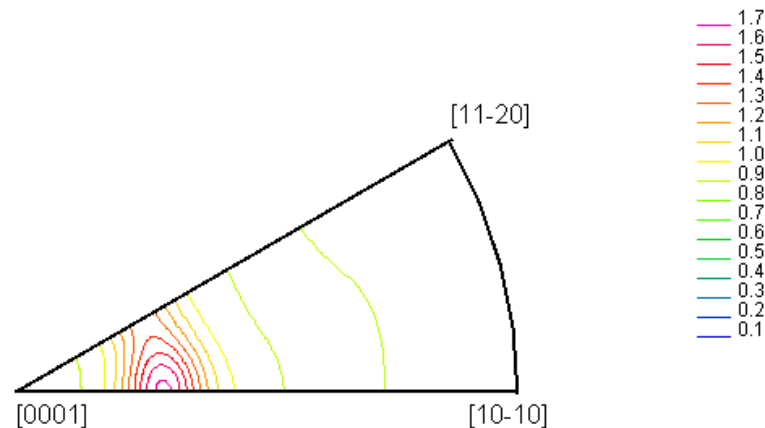


CTRソフトウェアで逆極点図解析

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



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

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

逆極点Plane \leftrightarrow Direction

File Help

Max index: 15
 Method: Plane
 Material: Magnesium.txt
 φ : 32.02 β : 30.0 Center[001]

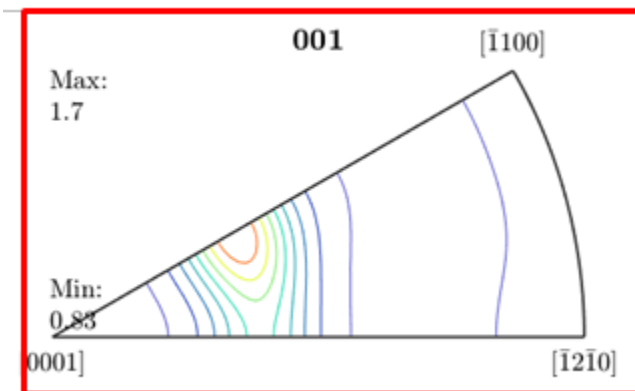
32.02 30.0 \rightarrow (1 0 3) \rightarrow (1 0 -1 3)

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]

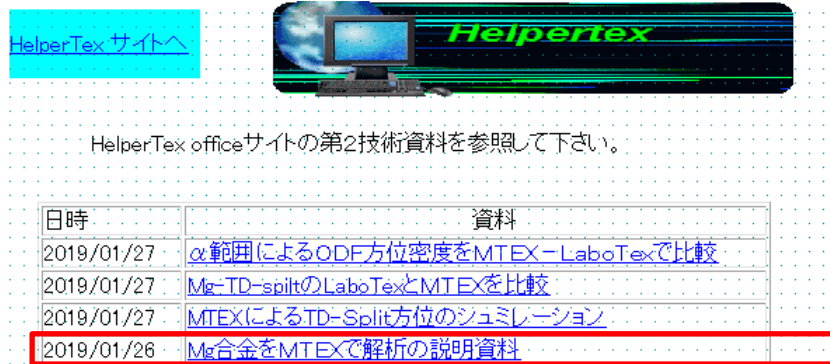
Inverse center: (0 0 1)

MTEXの逆極点表示



最後に

MTEXでHexagonal計算は他の資料も参考にしてください。



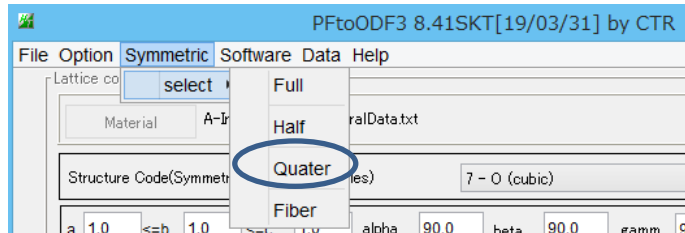
HelperTex サイトへ

HelperTex officeサイトの第2技術資料を参照して下さい。

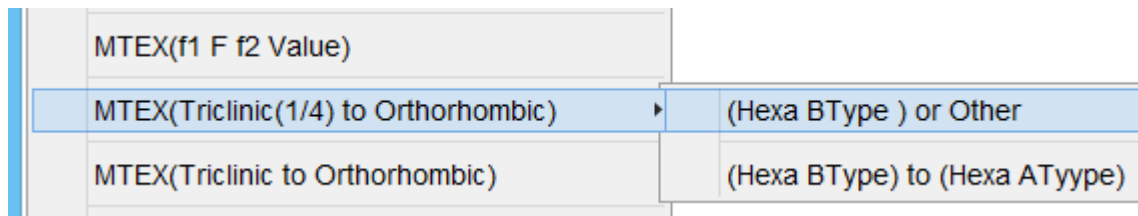
日時	資料
2019/01/27	α範囲によるODF方位密度をMTEX-LaboTexで比較
2019/01/27	Mg-TD-splitのLaboTexとMTEXを比較
2019/01/27	MTEXによるTD-Split方位のシミュレーション
2019/01/26	Mg合金をMTEXで解析の説明資料

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



Triclinicで使用
Orthorombicで使用
使用しない