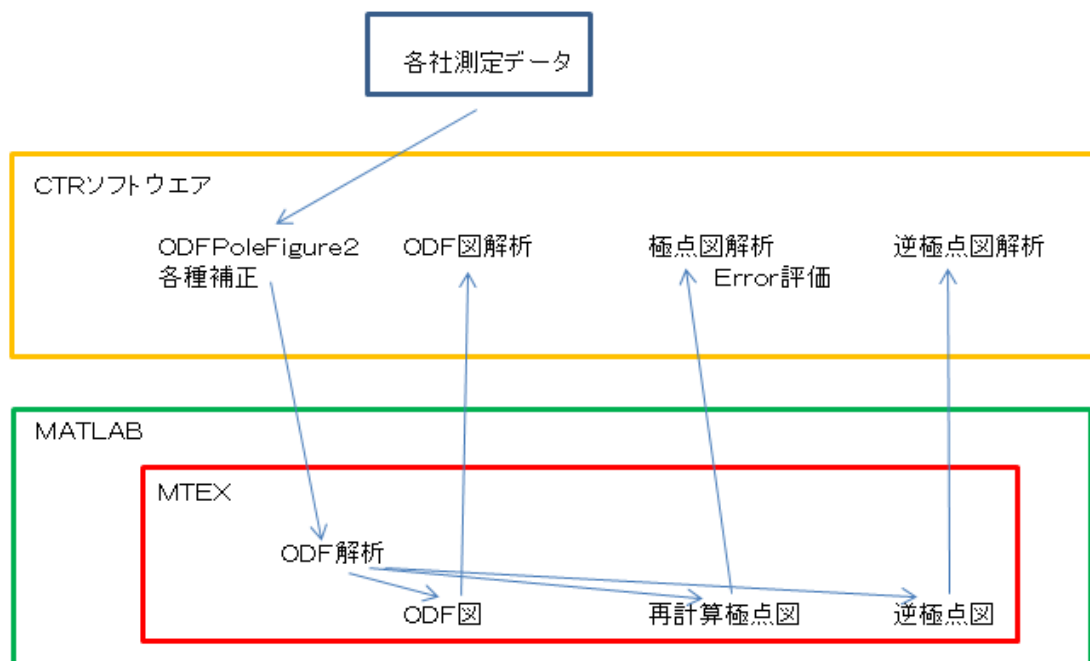


# MTEXソフトウェアと周辺ソフトウェアの使い方 (Rigaku,Bruker,PANalytical データに対応)



2019年02月12日



*HelperTex Office*

[odftex@ybb.ne.jp](mailto:odftex@ybb.ne.jp)

## 1. 概要

MATLABベースのMTEXはフリーのODF解析ソフトウェアでEBSD, XRDで使われている。

MATLABの試用期間中に、リガクXRD測定極点図からCTRソフトウェアで極点処理を行いMTEXの読み込み、ODF解析、再計算極点図、逆極点図を描画し、操作手順をまとめた。

試行錯誤であるが、解析結果は正しい、Harmonic法とADC法の間値が得られる。

Bruker (Uxd) 社データは、Uxd to AscでAscデータ変換

PANalytical (txt, xrdml) 社データはPANa to AscでAsc変換を行いCTRソフトウェアを介してMTEXソフトウェアで解析可能になります。

## 2. 解析に使用した入力データ

測定装置 リガク製RINT2200+多目的試料台

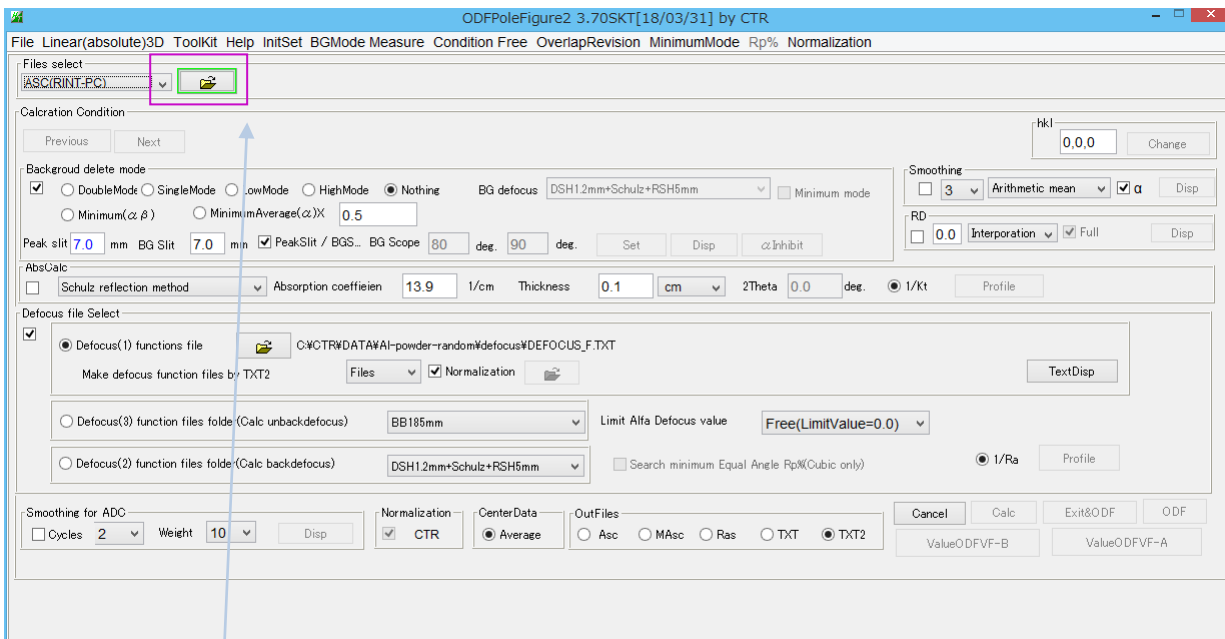
測定試料 Al材

## 3. 極点図データ補正

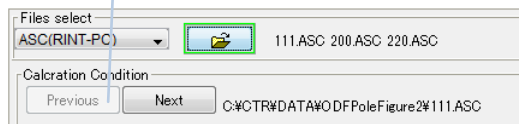
### 3.1 ODFPoleFigure2 ソフトウェア

(詳しくは、<http://www.geocities.jp/helpertex2>)

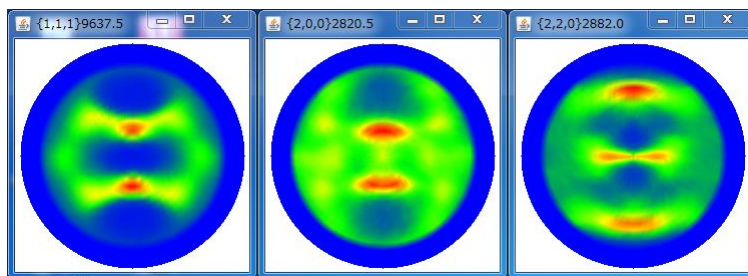
ODFPoleFigure2 ソフトウェアを起動



### 3.1 測定データの選択

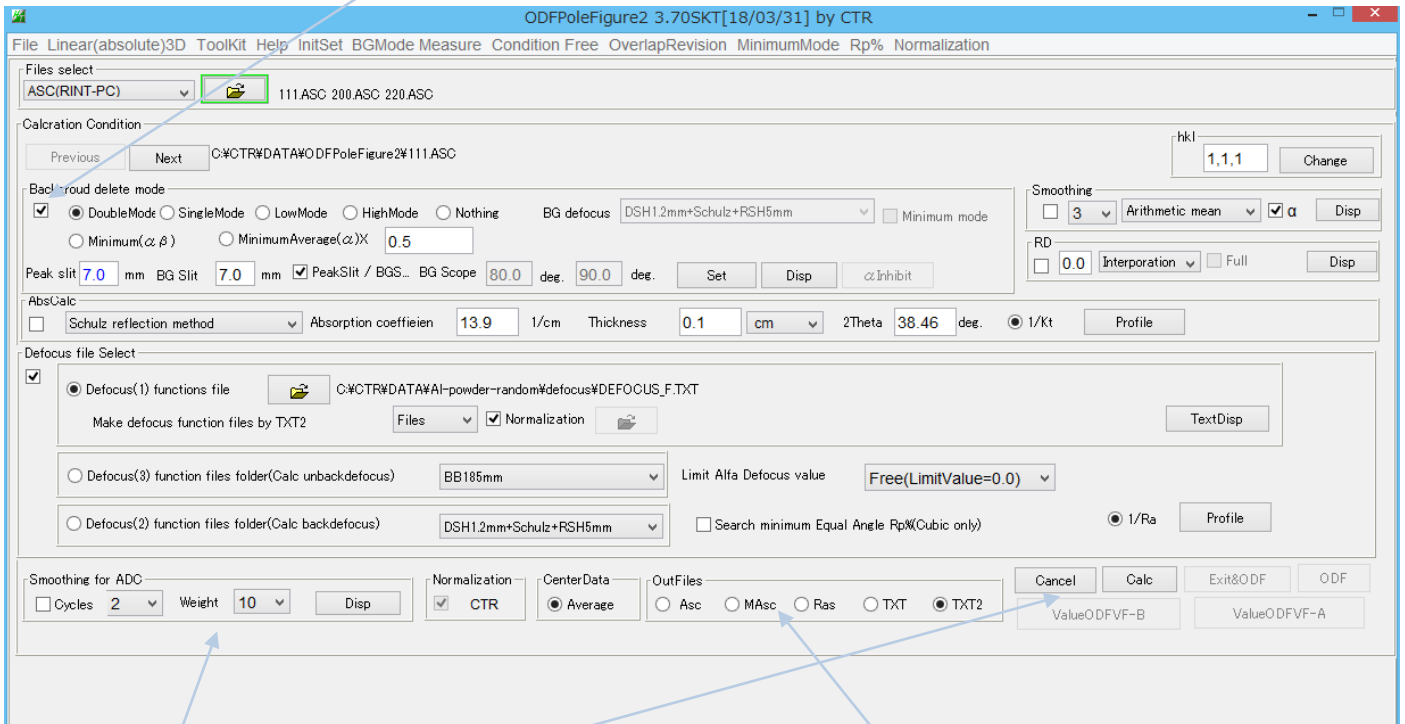


選択したファイルと極点図が表示される。



### 3. 2 データ処理条件を設定する。

バックグラウンドは計算で補正する。



defocusはrandomサンプルを用いて計算する

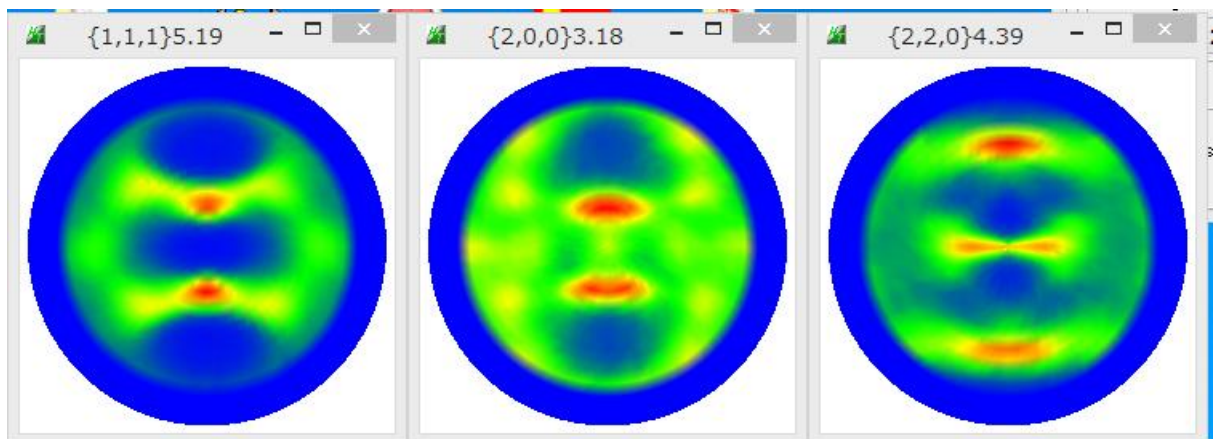
処理結果はAsc(or MAsc)とTXT2

5度間隔の場合β終了角度: Asc(360)、MAsc(355)

CalcErrorPF0対策で73->72にしたが機能せず

### 3. 3 一括正極点図データ処理

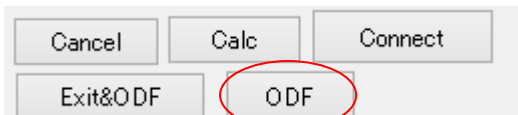
Calcで各種計算が始まり



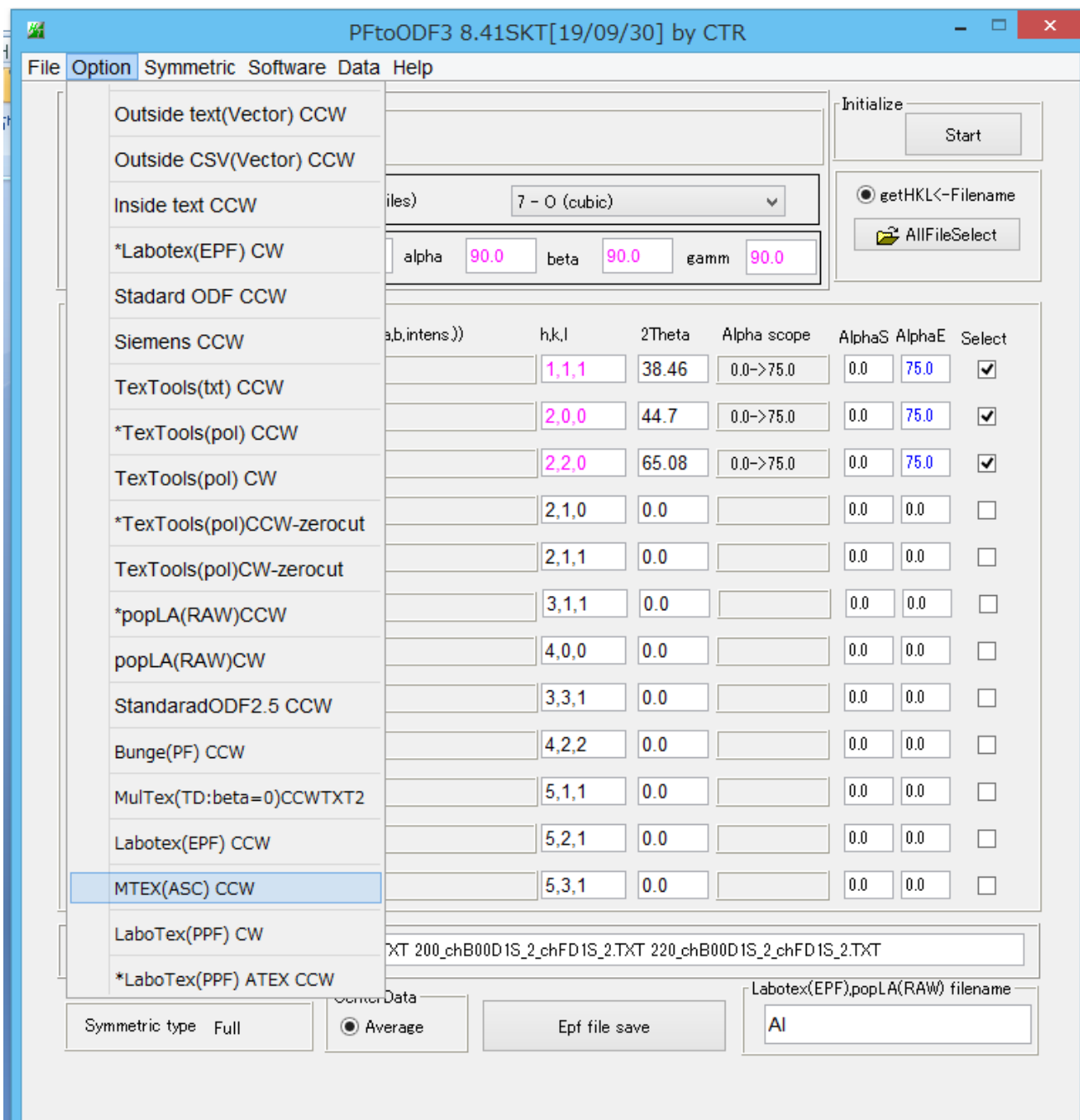
処理された極点図が表示される

```

C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\111.ASC
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\200.ASC
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\220.ASC
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\311.ASC
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\111_chB00D1 CAS_2.TXT
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\200_chB00D1 CAS_2.TXT
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\220_chB00D1 CAS_2.TXT
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\NEW\111_chB00D1 CAS_2.asc
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\NEW\200_chB00D1 CAS_2.asc
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\NEW\220_chB00D1 CAS_2.asc
    
```

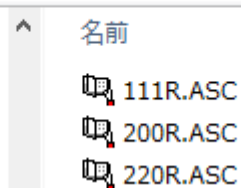


でMTEX入力データ作成



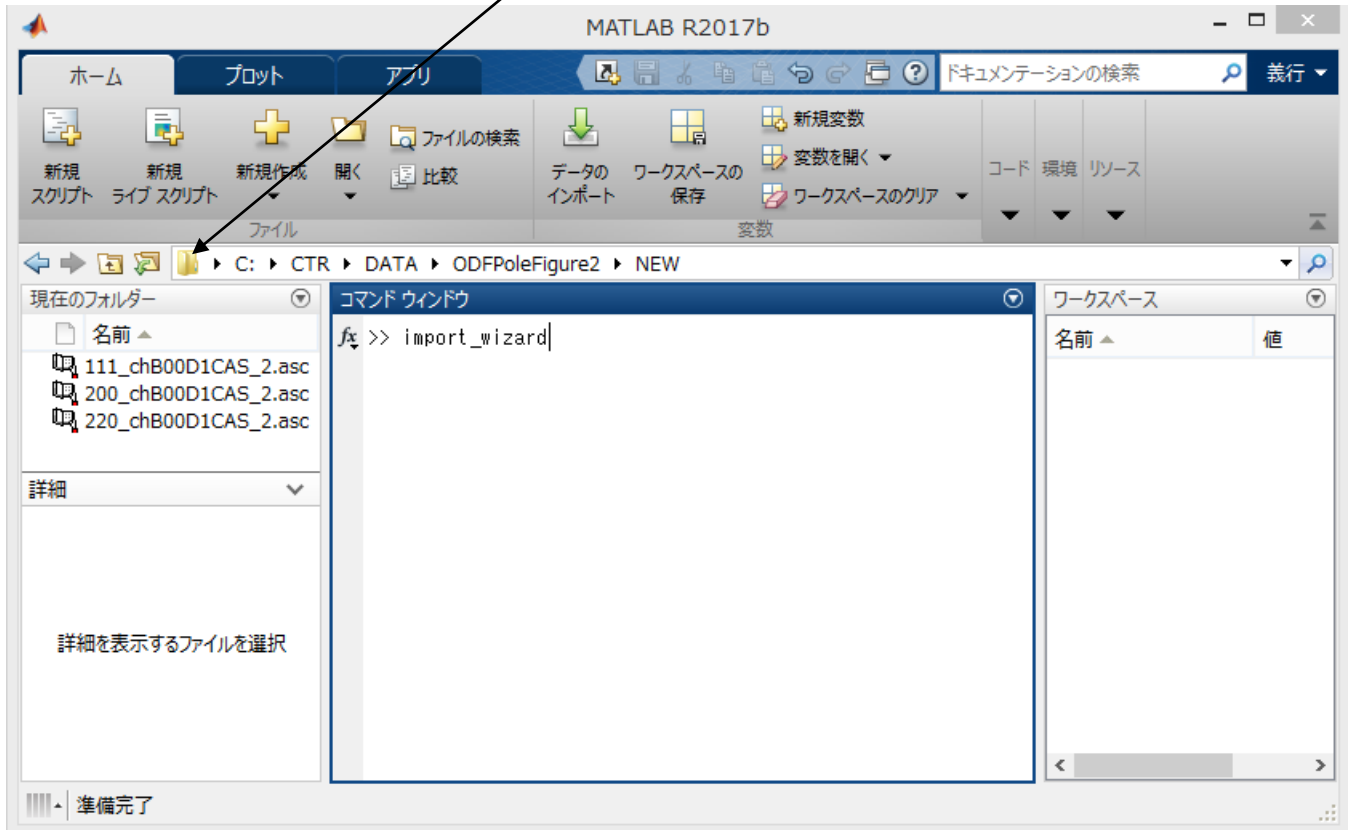
新たにMTEXホルダが作成されMTEX入力データが作成される。

DATA ▶ ODFPoleFigure2 ▶ MTEX

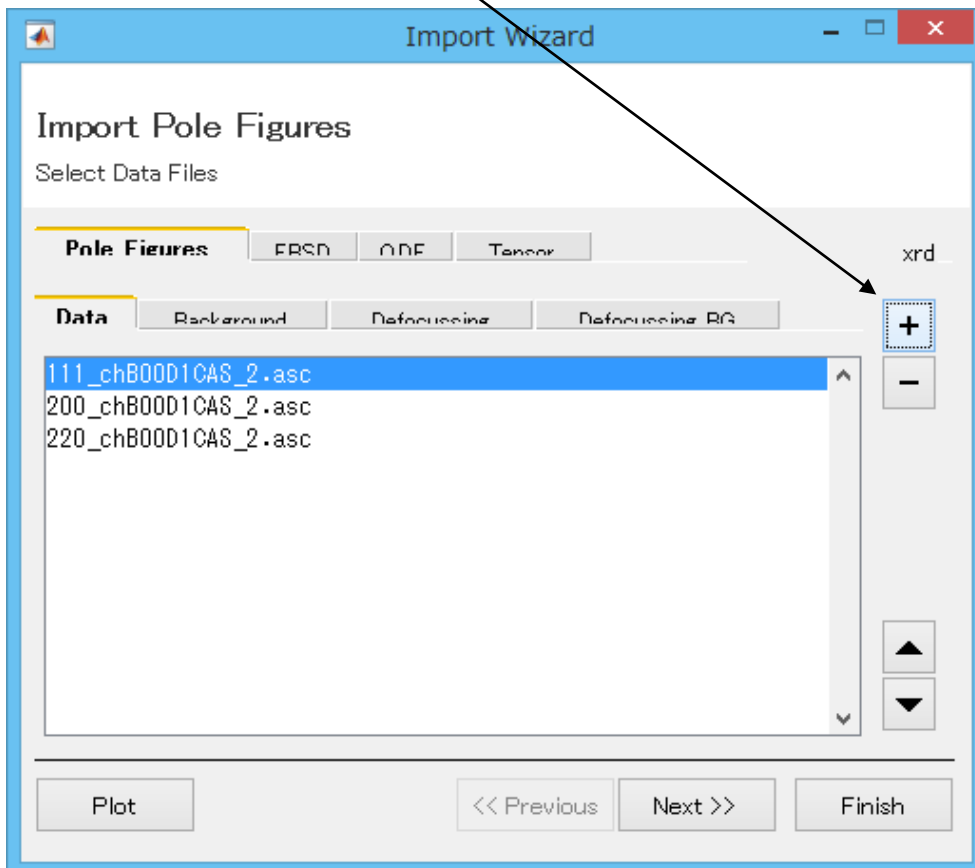


#### 4. MTEXにASCデータを読み込む

フォルダを作成したASCデータホルダに移動し、import\_wizard



+でASCファイルを複数選択



Load Cif File

で Aluminum を選択

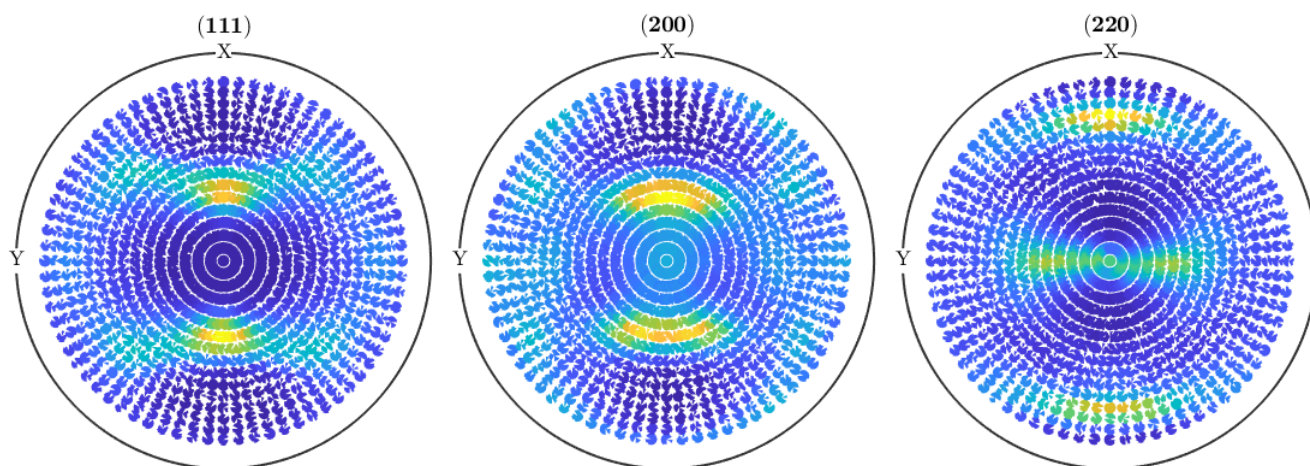
The screenshot shows the 'Crystal Reference Frame' dialog box. It has a title bar 'Import Wizard' and a subtitle 'Crystal Reference Frame'. Under 'Crystal Symmetry', there are two radio buttons: 'Indexed' (selected) and 'Not Indexed'. Below that, 'mineral name' is set to 'Aluminum' and 'plotting color' is 'light blue'. A 'Load Cif File' button is on the right. The 'Crystal Coordinate System' section includes 'Point Group' set to 'm-3m', 'Axis Length' with 'a', 'b', and 'c' all set to '4.04958', and 'Axis Angle' with 'alpha', 'beta', and 'gamma' all set to '90'. At the bottom, there are 'Plot', '<< Previous', 'Next >>', and 'Finish' buttons. The 'Next >>' button is circled in red.

The screenshot shows the 'Specimen Reference Frame' dialog box. It has a title bar 'Import Wizard' and a subtitle 'Specimen Reference Frame'. Under 'Specimen Symmetry', there is a section for 'Specimen Coordinate System' with 'rotate data by Euler angles (Bunge) in degree' set to '0', '0', '0' and 'specimen symmetry' set to '-1 triclinic'. Below that is the 'MTEX Plotting Convention' section with eight coordinate system diagrams. The second diagram, showing Y pointing up, X pointing right, and Z pointing down, is highlighted with a blue border. Below the diagrams is the text 'Plot ther data to verify that the coordinate system is properly aligned!'. At the bottom, there are 'Plot', '<< Previous', 'Next >>', and 'Finish' buttons. The 'Next >>' button is highlighted with a blue border.

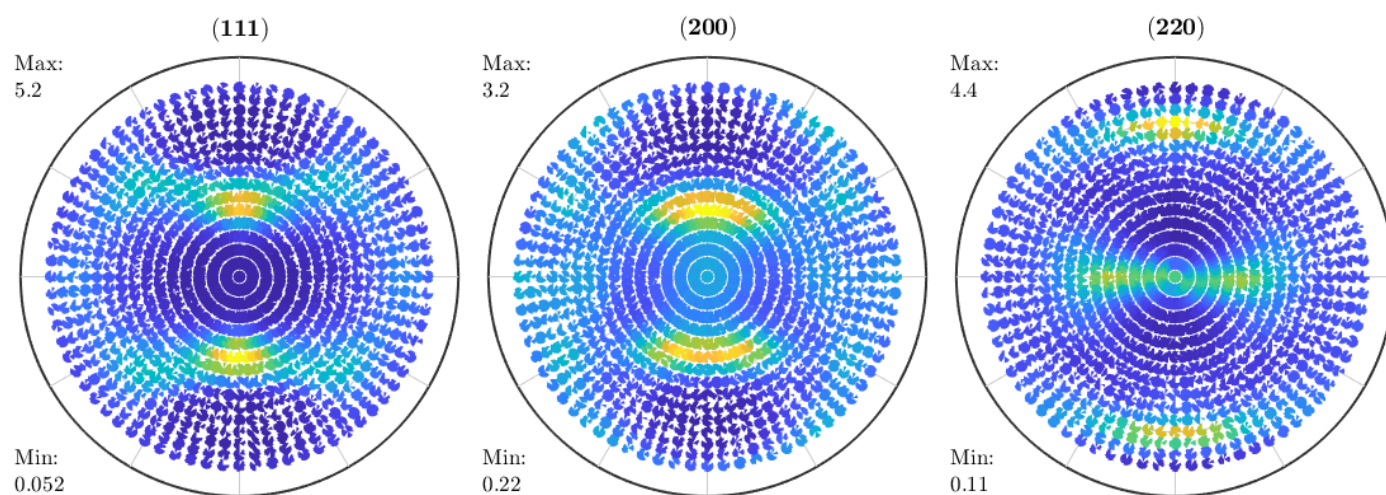
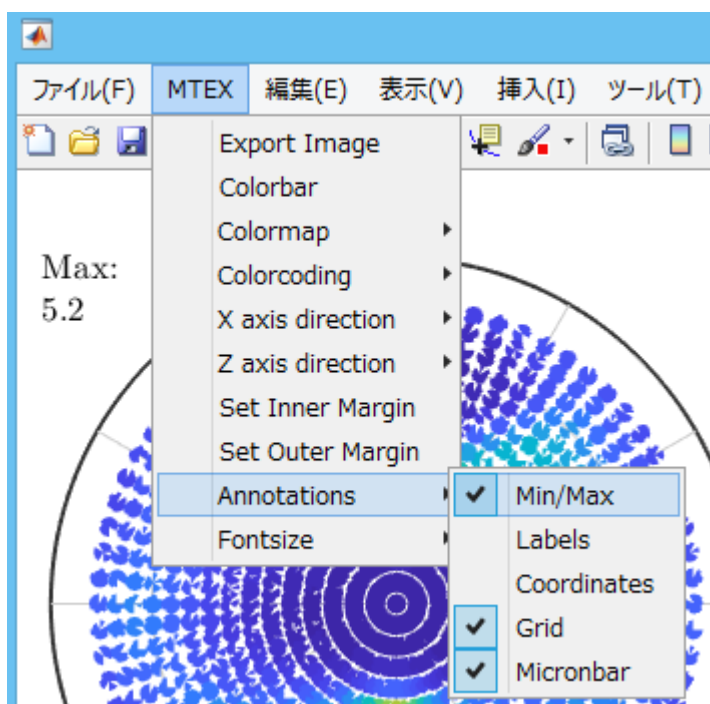
Plot

で極点図を確認

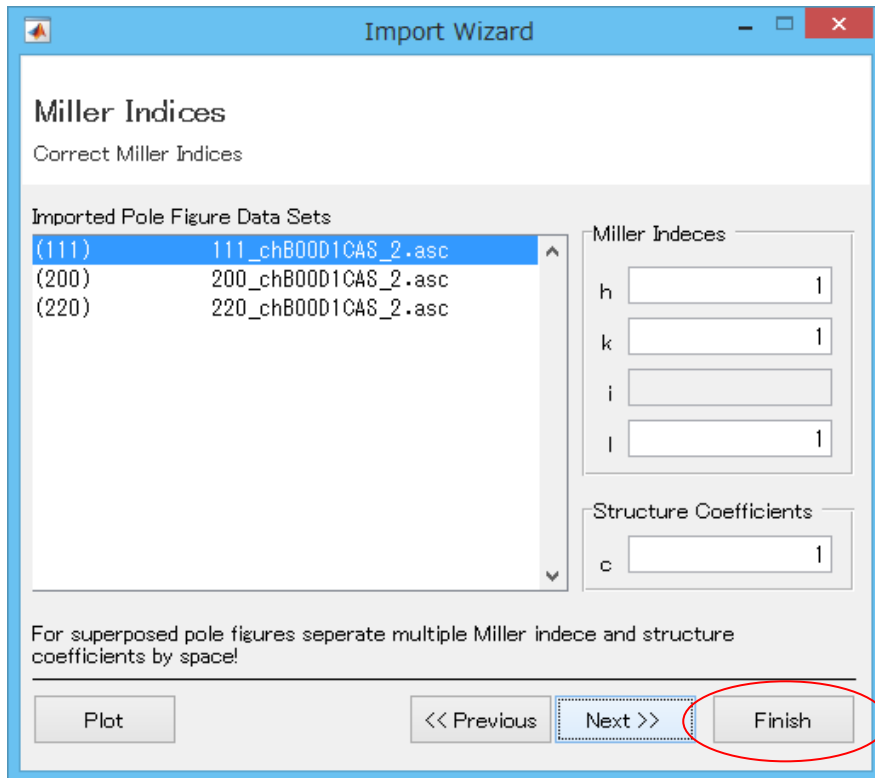




最大値を表示



Next >>



作成されたコード

```
% crystal symmetry
CS = crystalSymmetry('m-3m', [4.0496 4.0496 4.0496], 'mineral', 'Aluminum', 'color', 'light blue');

% specimen symmetry
SS = specimenSymmetry('1');

% plotting convention
setMTEXpref('xAxisDirection', 'north');
setMTEXpref('zAxisDirection', 'outOfPlane');

%% Specify File Names

% path to files
pname = 'C:\CTR\DATA\%ODFPoleFigure2\NEW';

% which files to be imported
fname = {...
    [pname '%111_chB00D1CAS_2.asc'],...
    [pname '%200_chB00D1CAS_2.asc'],...
    [pname '%220_chB00D1CAS_2.asc'],...
};

%% Specify Miller Indices

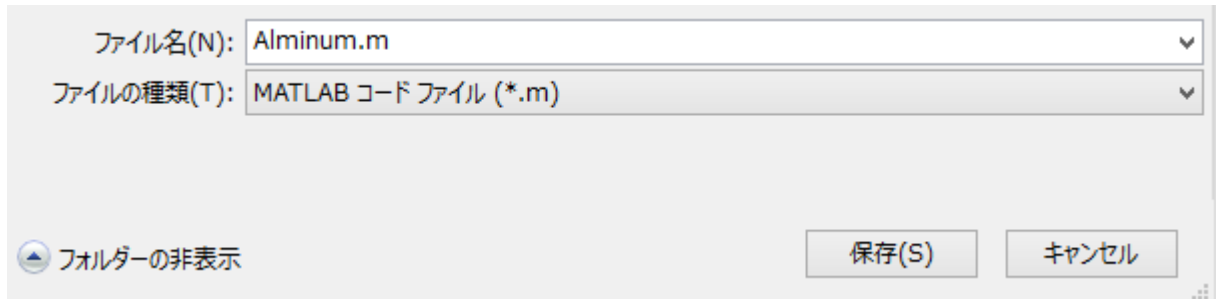
h = { ...
    Miller(1,1,1,CS),...
    Miller(2,0,0,CS),...
    Miller(2,2,0,CS),...
};

%% Import the Data

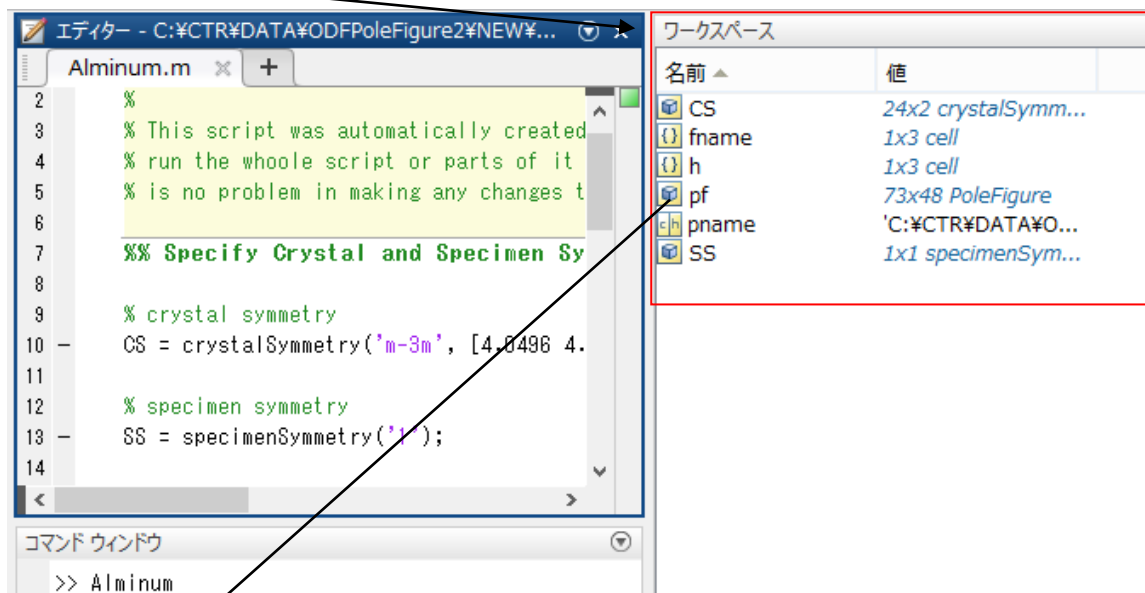
% create a Pole Figure variable containing the data
pf = loadPoleFigure(fname,h,CS,SS,'interface','xrd');
```



作成されたコードの実行

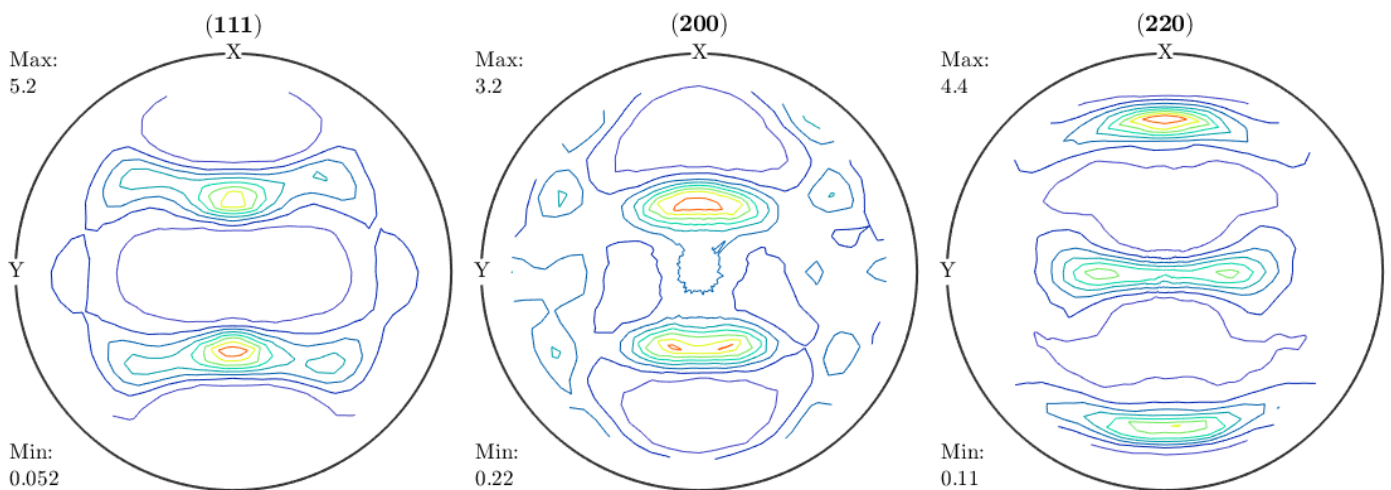


作成されたデータが表示される



極点図を表示

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



## p f から ODF の計算

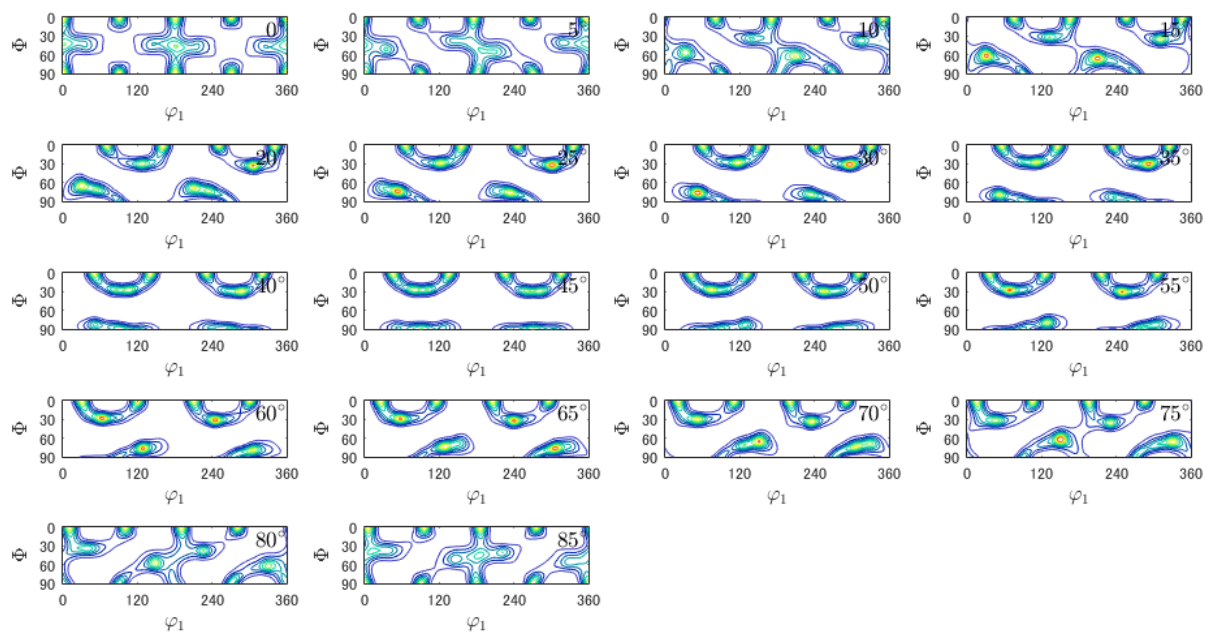
```
>> odf=calcODF(pf)
----- MTEX -- PDF to ODF inversion -----
Call c-routine
initialize solver
start iteration
error: 3.1148E-001 1.1795E-001 3.3280E-002 1.7239E-002 1.3419E-002 1.1554E-002 1.0147E-002 9.1748E-003 8.4108E-003 7.8130E-003 7.3089E-003
Finished PDF-ODF inversion.
error: 7.3089E-003
alpha: 1.0424E+000 1.0807E+000 9.4659E-001
required time: 4s

odf = ODF (show methods, plot)
crystal symmetry : Aluminum (432)
specimen symmetry: 1

Radially symmetric portion:
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°
center: 4955 orientations, resolution: 5°
weight: 1
```


## o d f から ODF 図の表示

```
>> plot(odf, 'contour', 'sections', 18)
```



ODF図のE x p o r t

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

 ODF.TXT

2019/02/12 6:56 テキスト文書

854 KB

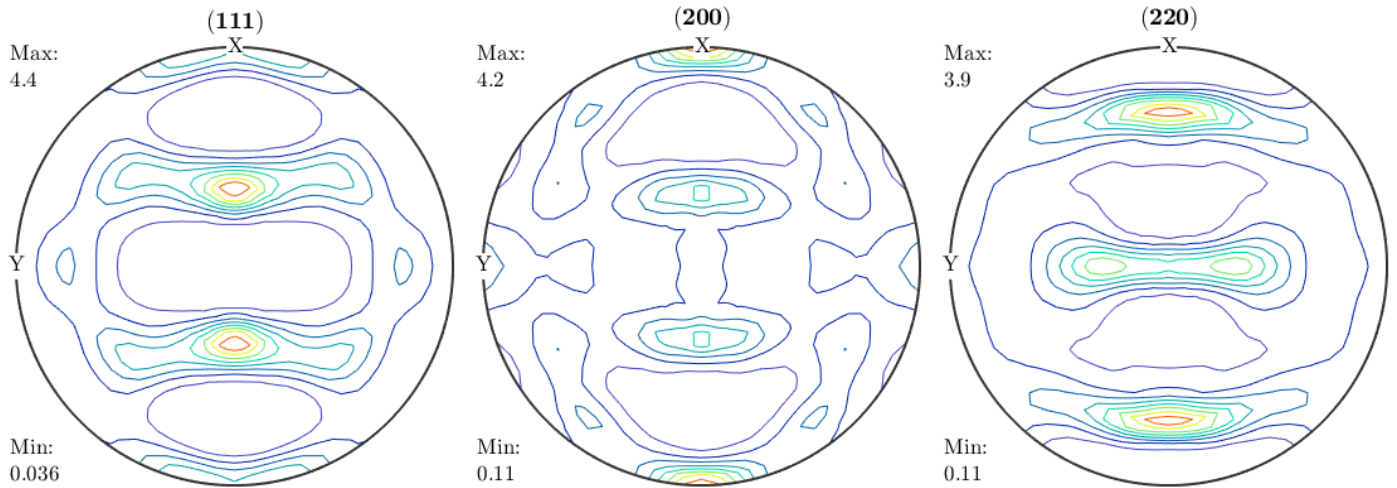
o d f から再計算極点図表示

```
>> pdf=calcPoleFigure(odf,h,'resolution',5*degree)

pdf = PoleFigure (show methods, plot)
crystal symmetry : Aluminum (432)
specimen symmetry: 222

h = (111), r = 72 x 19 points
h = (200), r = 72 x 19 points
h = (220), r = 72 x 19 points

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



極点図の E X p o r t

export(pf,'PF')

 PF_(220).txt	2019/02/12 6:57
 PF_(200).txt	2019/02/12 6:57
 PF_(111).txt	2019/02/12 6:57

o d f から逆極点図の表示

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

```
r = vector3d (show methods, plot)
```

```
size: 1 x 3
```

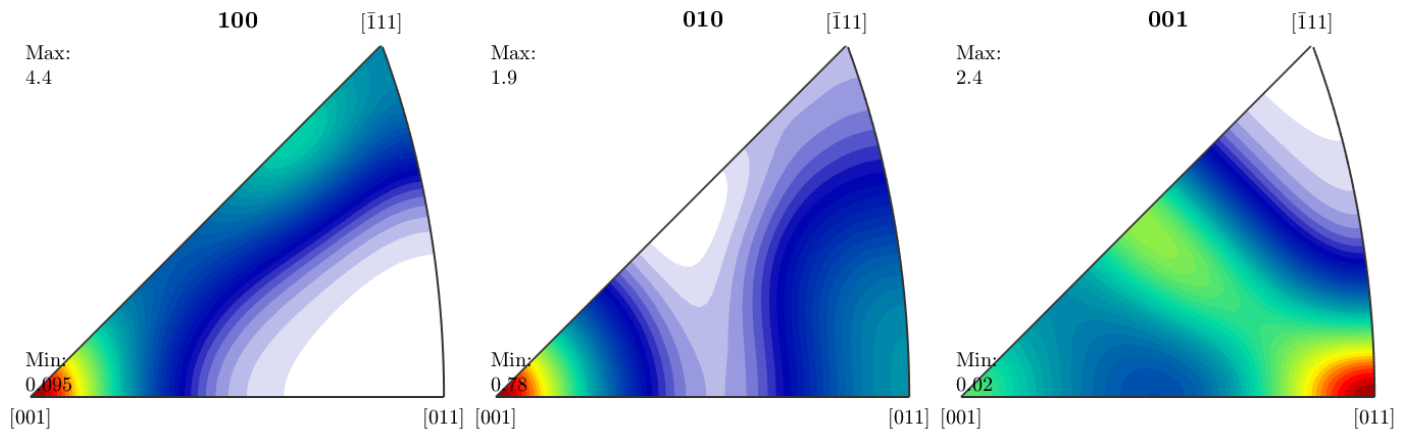
```
x y z
```

```
0 0 1
```

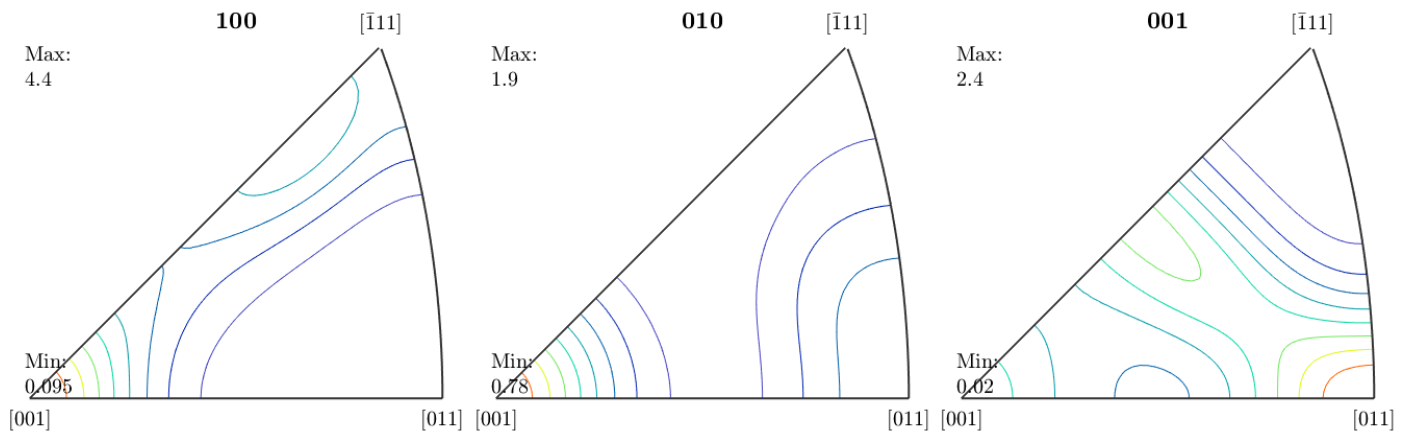
```
0 1 0
```

```
1 0 0
```

```
>> plotIPDF(odf,r)
```




```
>> plotIPDF(odf,r,'contour')
```



逆極点図の Export

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

 ND.TXT

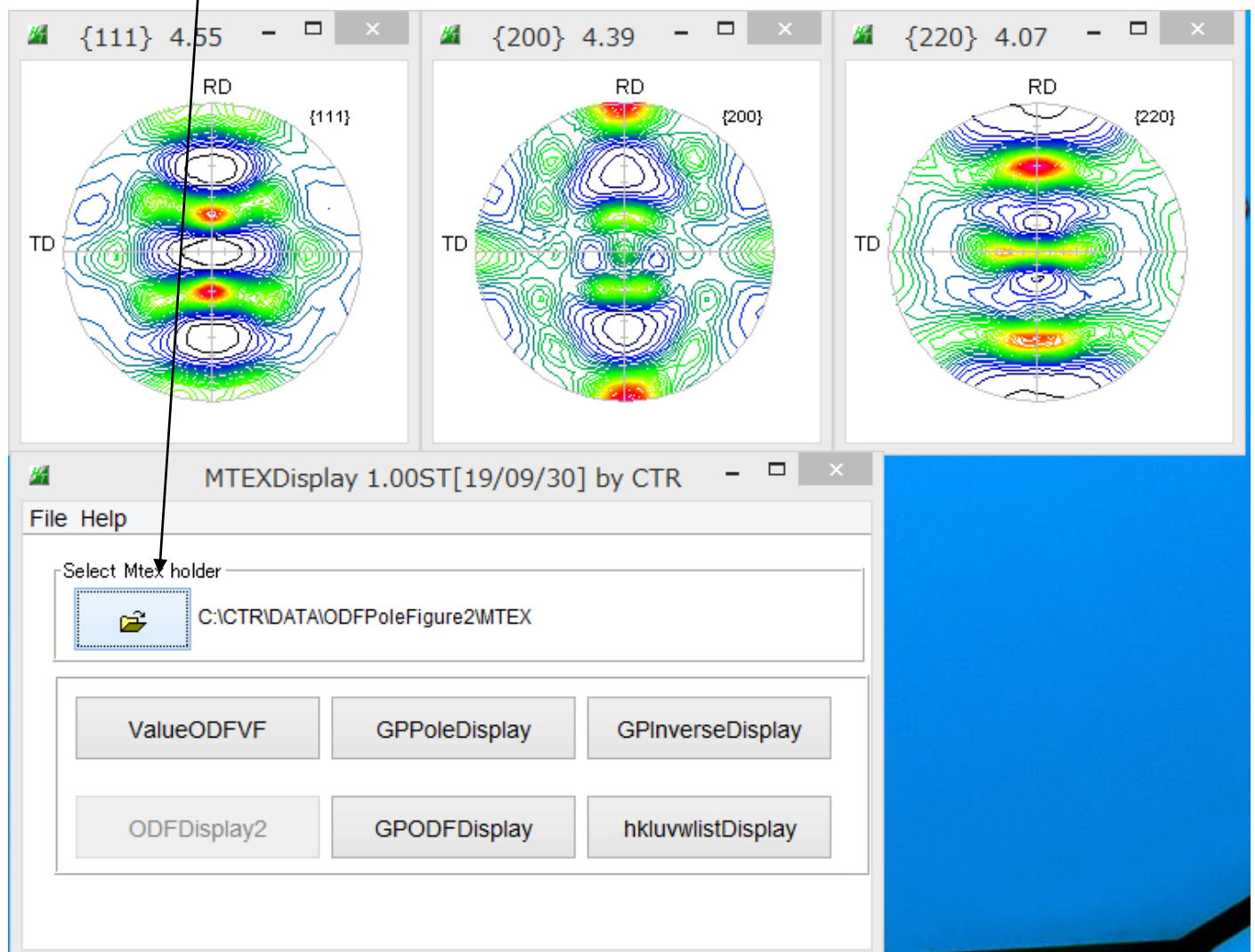
2019/02/12 7:01 テキスト文書

35 KB

## Exportしたデータの処理

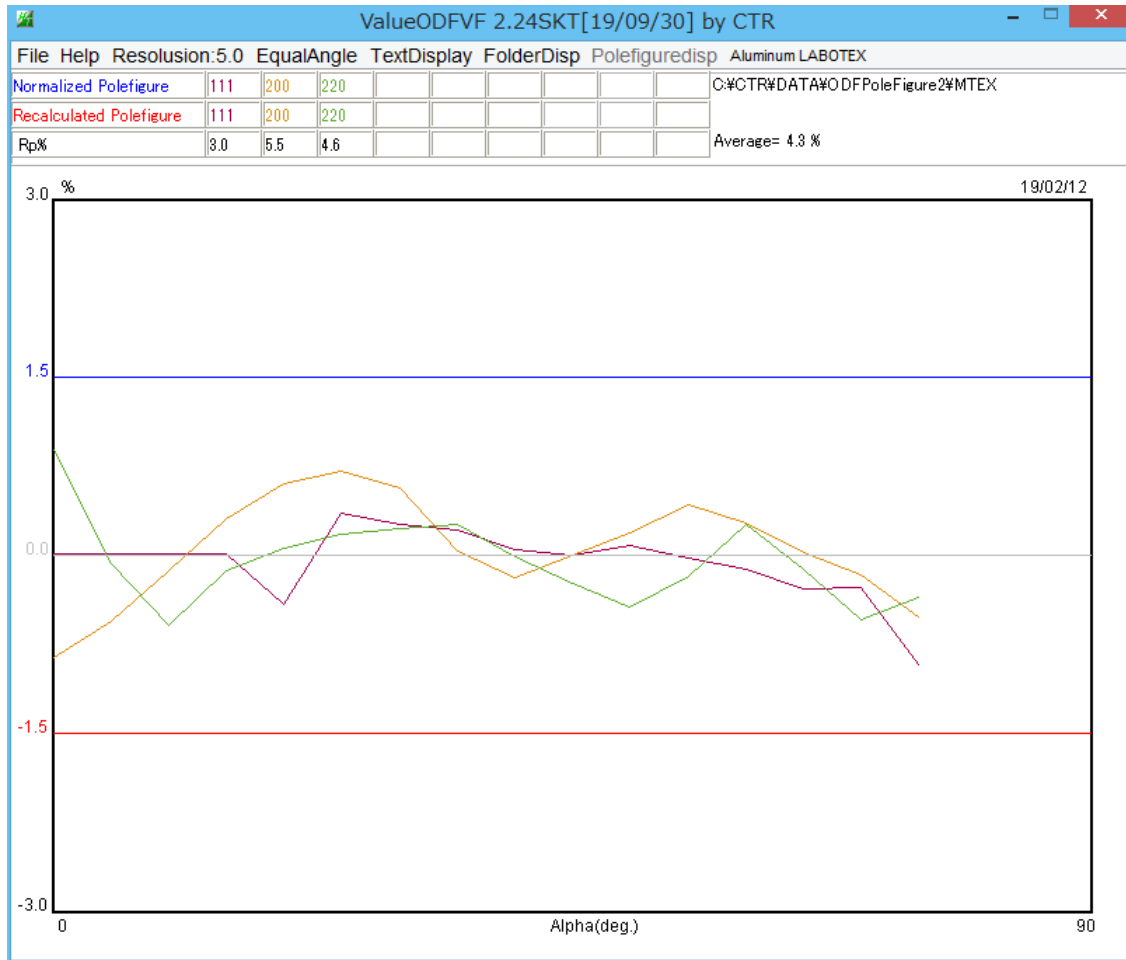
111R.ASC	2019/02/12 7:31	RINT20007キ-	17 KB
200R.ASC	2019/02/12 7:31	RINT20007キ-	17 KB
220R.ASC	2019/02/12 7:31	RINT20007キ-	17 KB
Untitled.m	2019/02/12 7:45	M ファイル	2 KB
ODF.TXT	2019/02/12 7:46	テキスト文書	854 KB
ND.TXT	2019/02/12 7:48	テキスト文書	35 KB
PF_(111).txt	2019/02/12 7:49	テキスト文書	67 KB
PF_(200).txt	2019/02/12 7:49	テキスト文書	67 KB
PF_(220).txt	2019/02/12 7:49	テキスト文書	67 KB

workフォルダを選択



# ValueODFVF

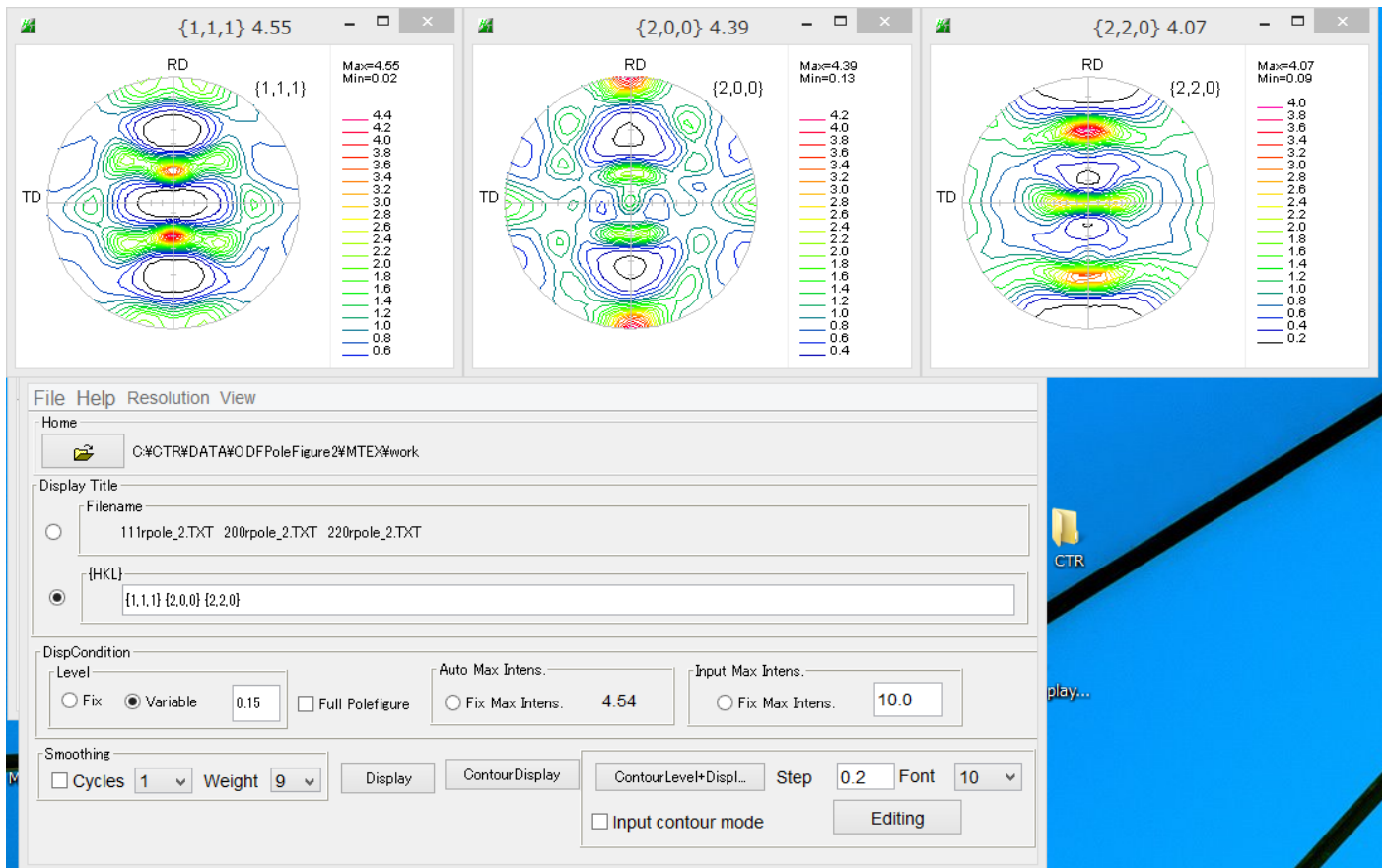
で入力データの E r r o r 評価



± 1.5%以内でほぼ正常である。

# GPPoleDisplay

で極点図表示

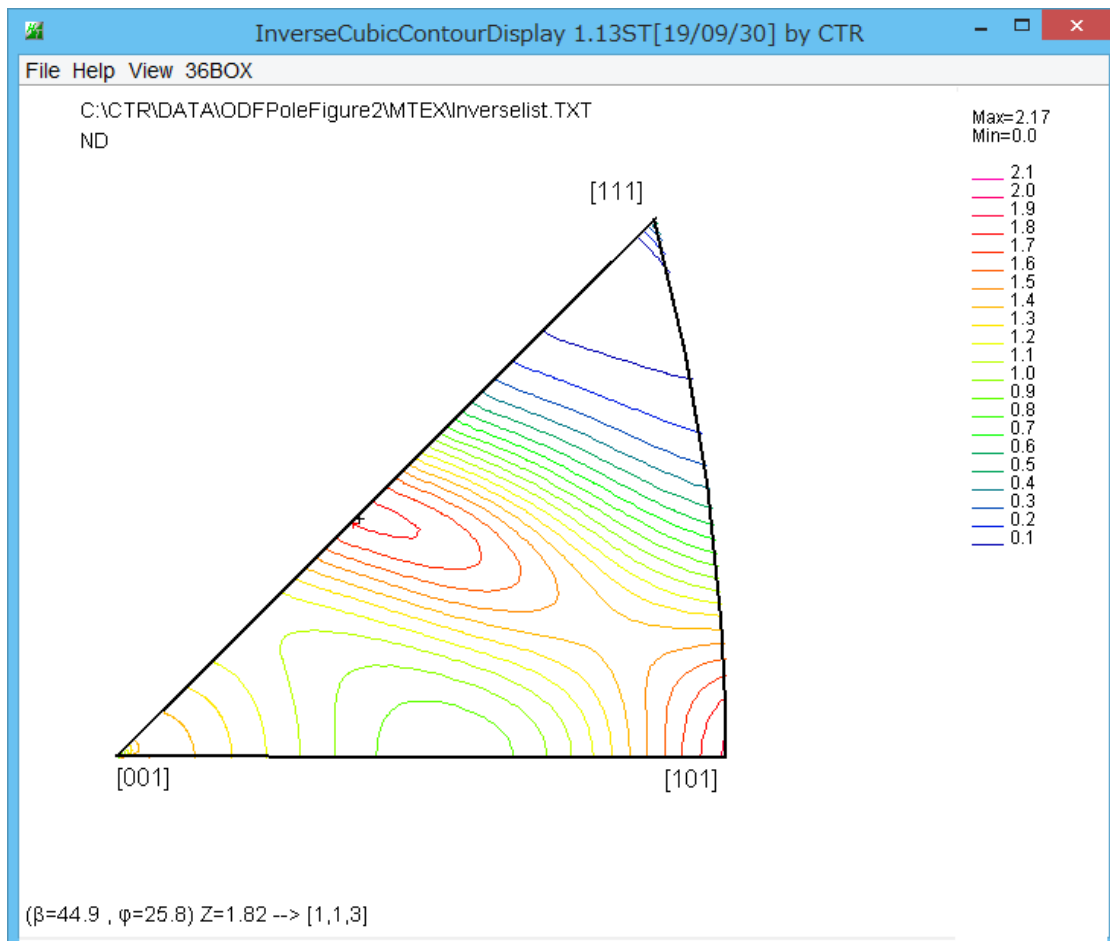
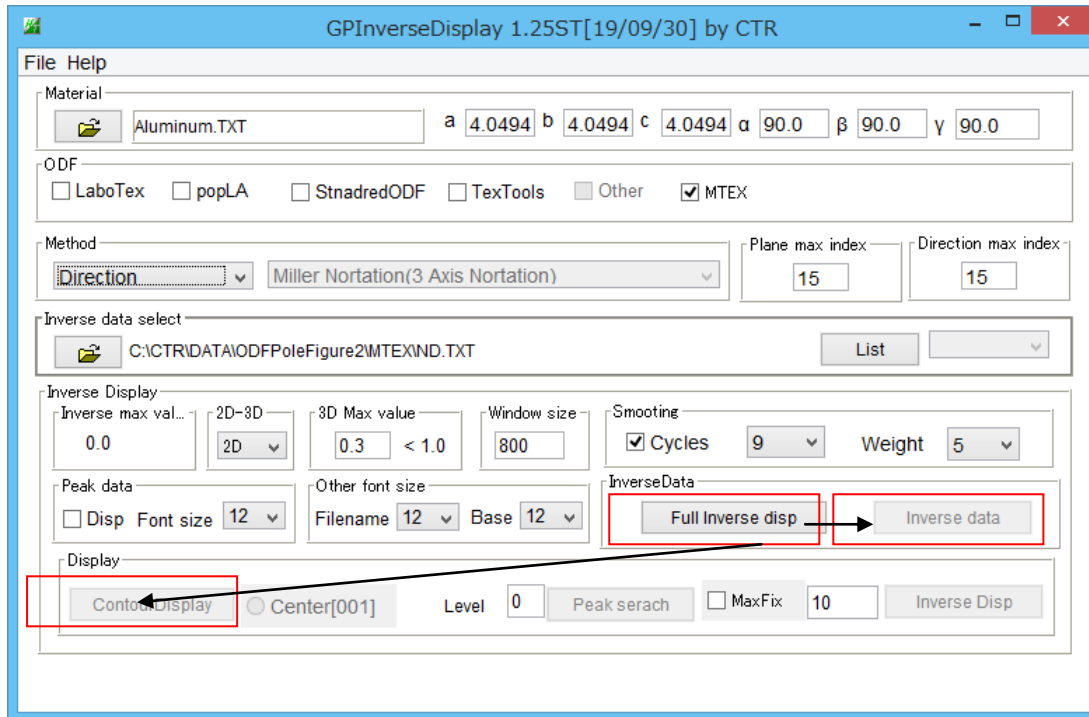


この再計算極点図から CTR ソフトウェアの各種処理が利用可能



# GPInverseDisplay

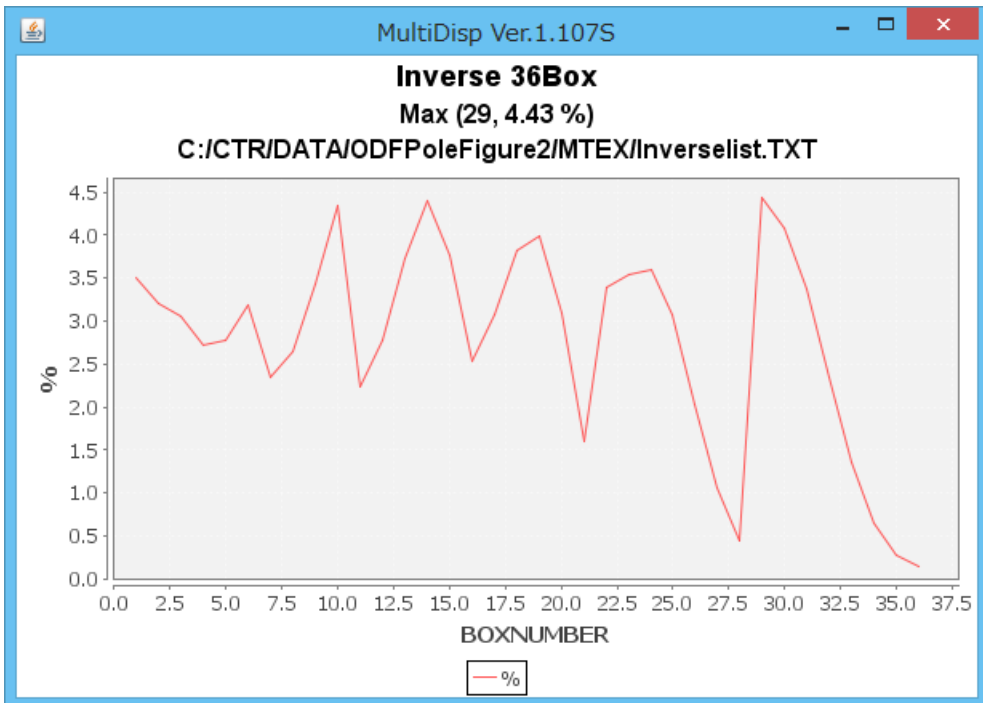
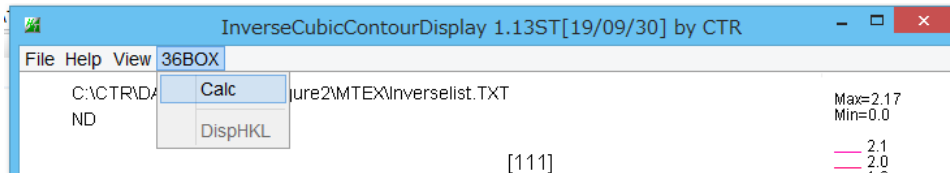
で逆極点図表示



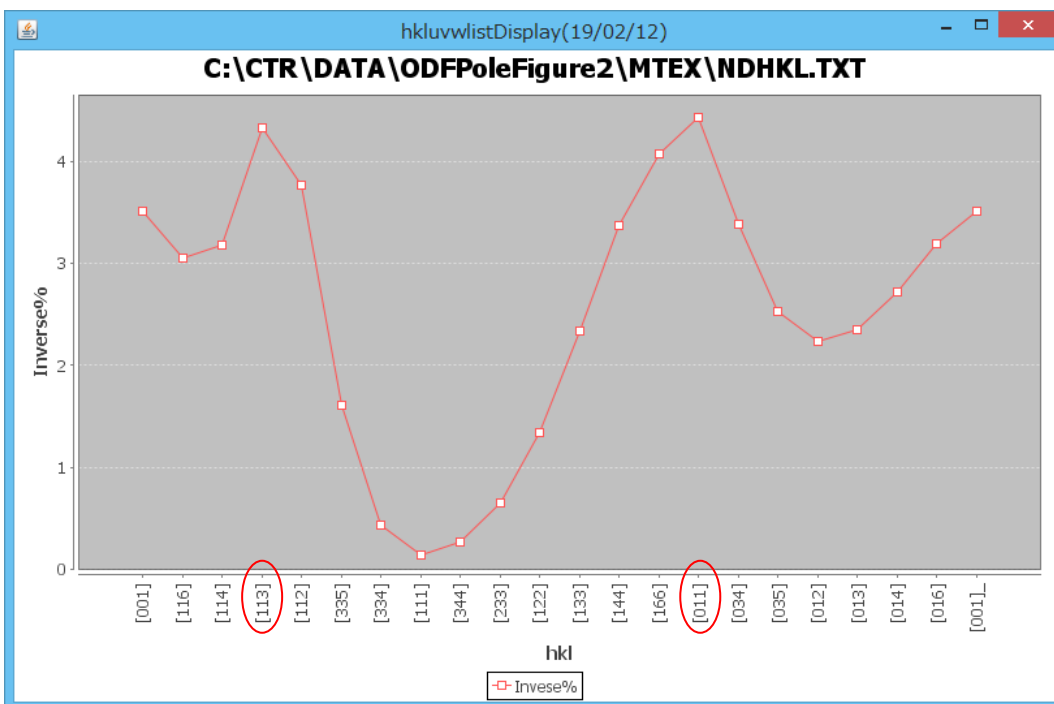
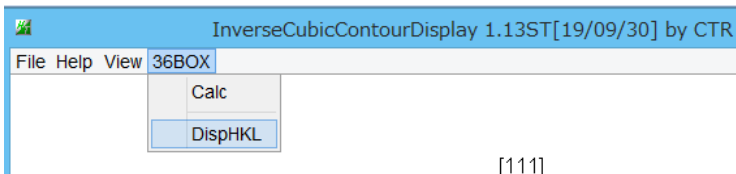
この逆極点図から CTR ソフトウェアの各種処理が利用可能

逆極点プロファイル

36BOXの定量

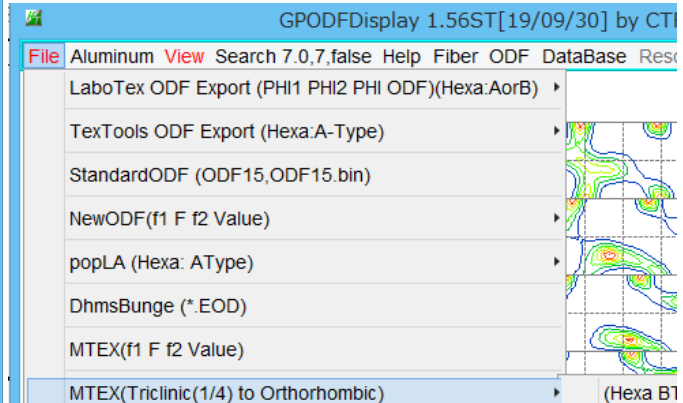
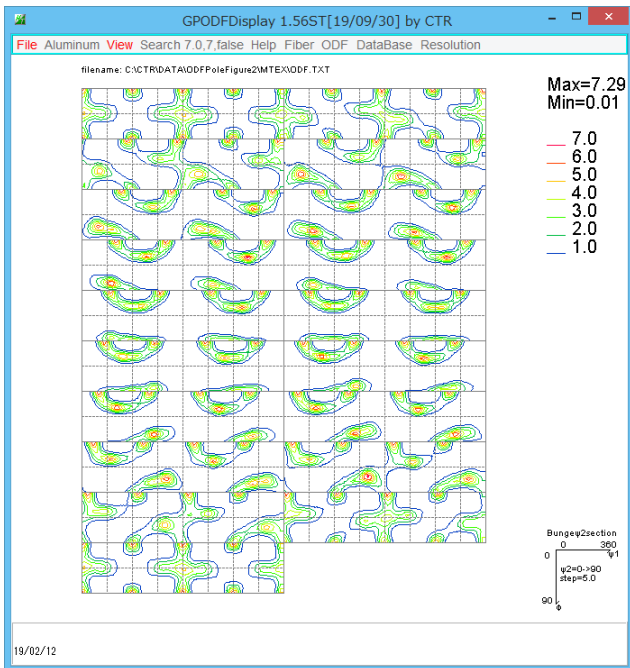


36Boxから逆極点図外周部分の方位で表示



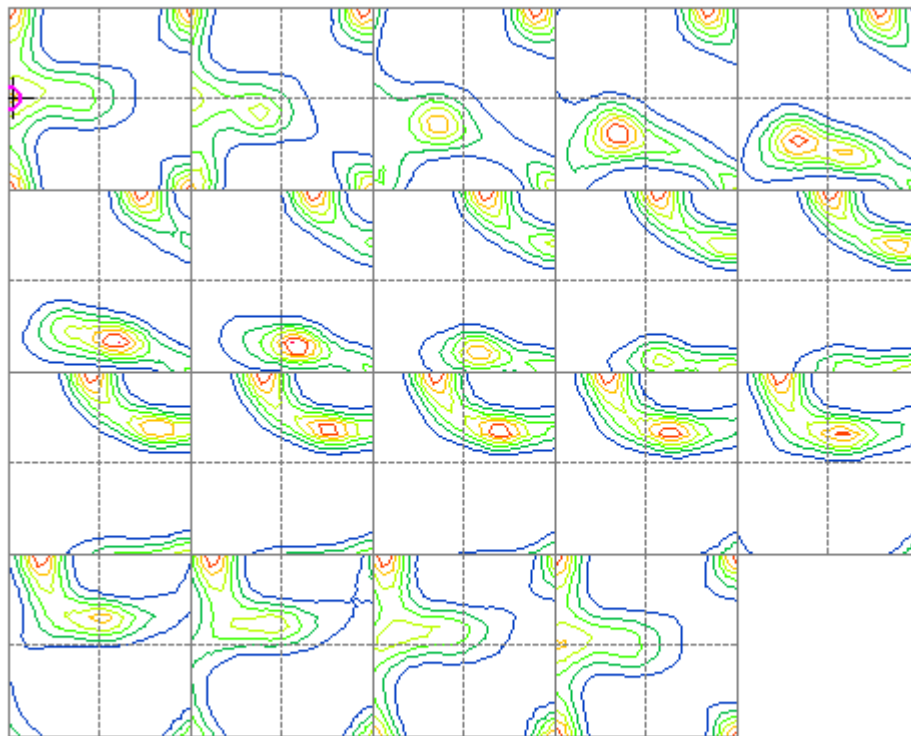
# GPODFDisplay

でODF図表示



Triclinic → Orthorhombic を行う

filename: C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\MTEX\ODF.TXT



Max=7.29  
Min=0.01

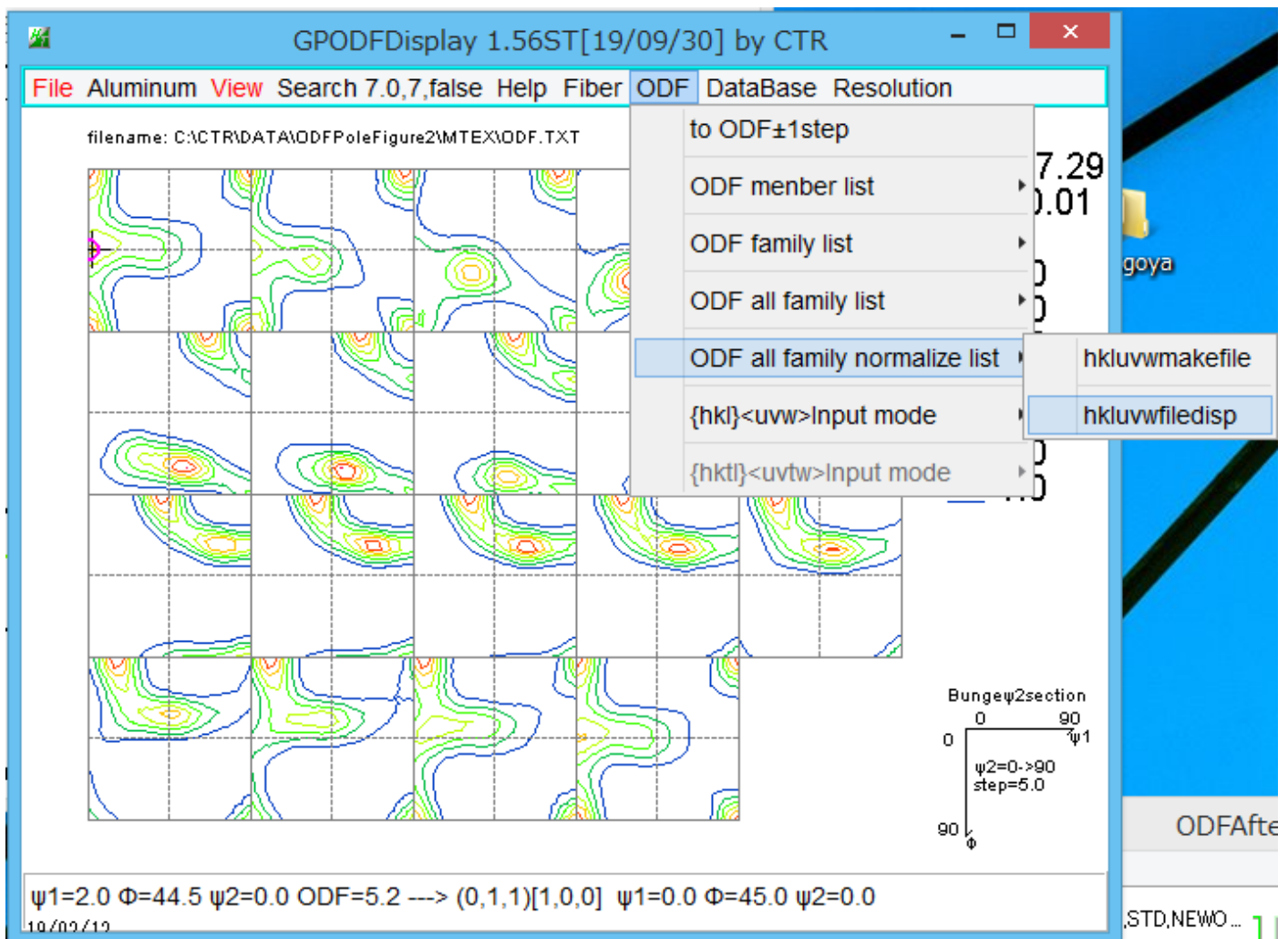
7.0  
6.0  
5.0  
4.0  
3.0  
2.0  
1.0

Bunge  $\psi_2$  section  
0 90  
 $\psi_1$   
 $\psi_2=0 \rightarrow 90$   
step=5.0  
90  
 $\phi$

$\psi_1=2.0 \Phi=44.5 \psi_2=0.0 \text{ ODF}=5.2 \rightarrow (0,1,1)[1,0,0] \psi_1=0.0 \Phi=45.0 \psi_2=0.0$

この ODF 図から CTR ソフトウェアの各種処理が利用可能

例えば



で結晶方位リストを表示

