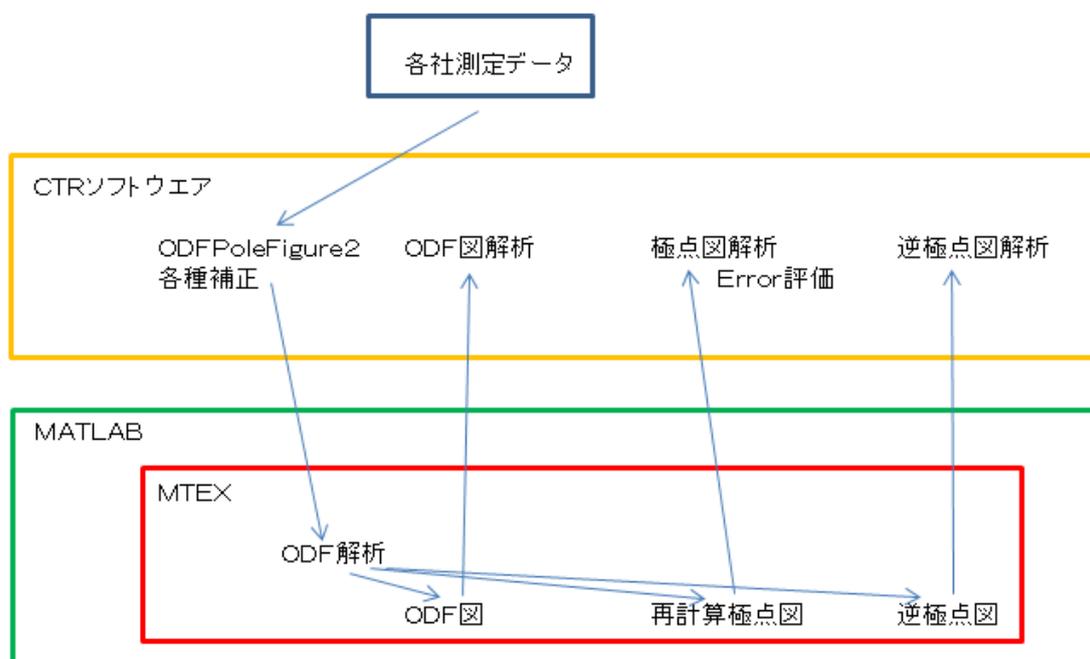


MTEXソフトウェアと周辺ソフトウェアの使い方
(Rigaku, Bruker, PANalytical データに対応)



2019年02月12日



HelperTex Office

odftex@ybb.ne.jp

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、Hermonic法とADC法の間値が得られる。

Brucker (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

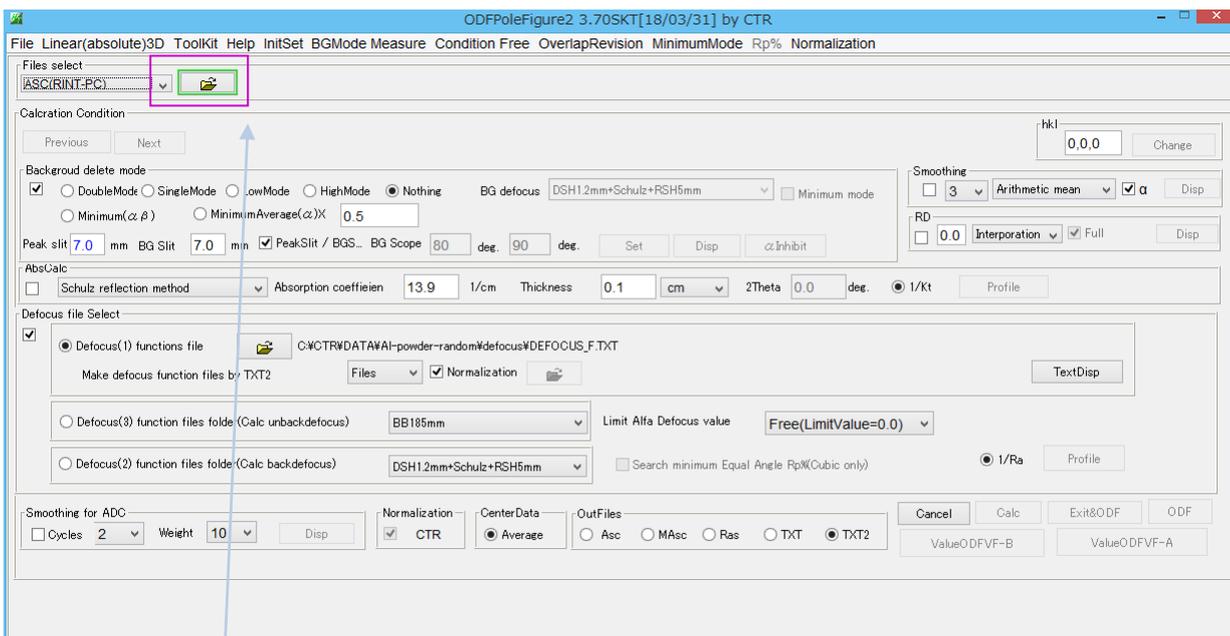
測定試料 Al材

3. 極点図データ補正

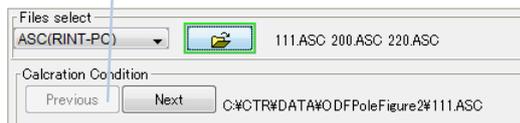
3.1 ODFPoleFigure2 ソフトウェア

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

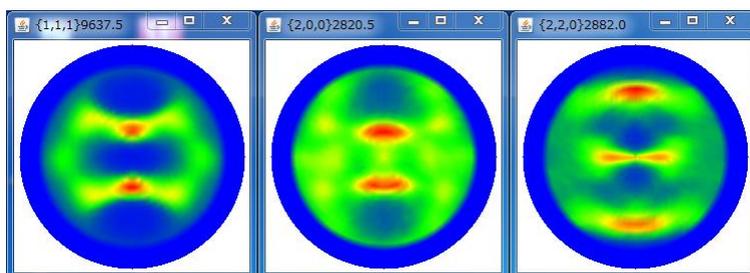
ODFPoleFigure2 ソフトウェアを起動



3.1 測定データの選択

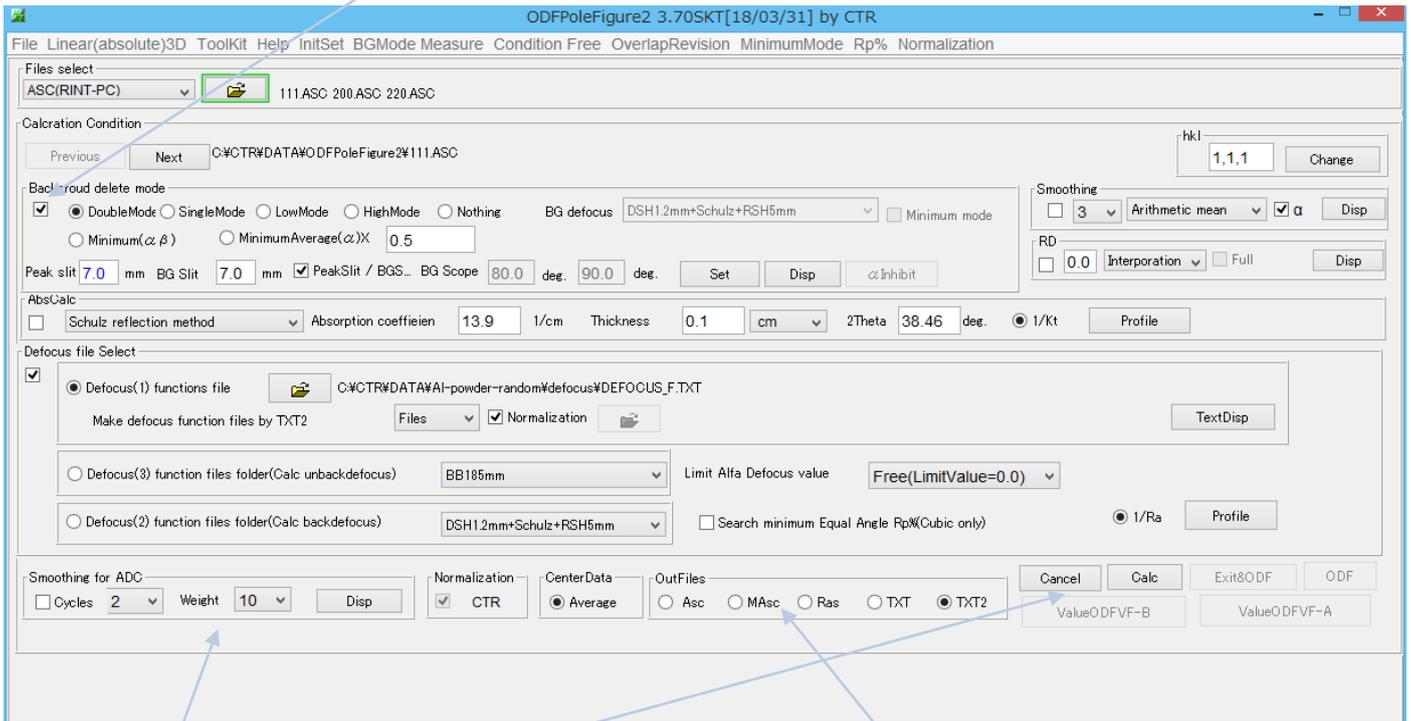


選択したファイルと極点図が表示される。



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

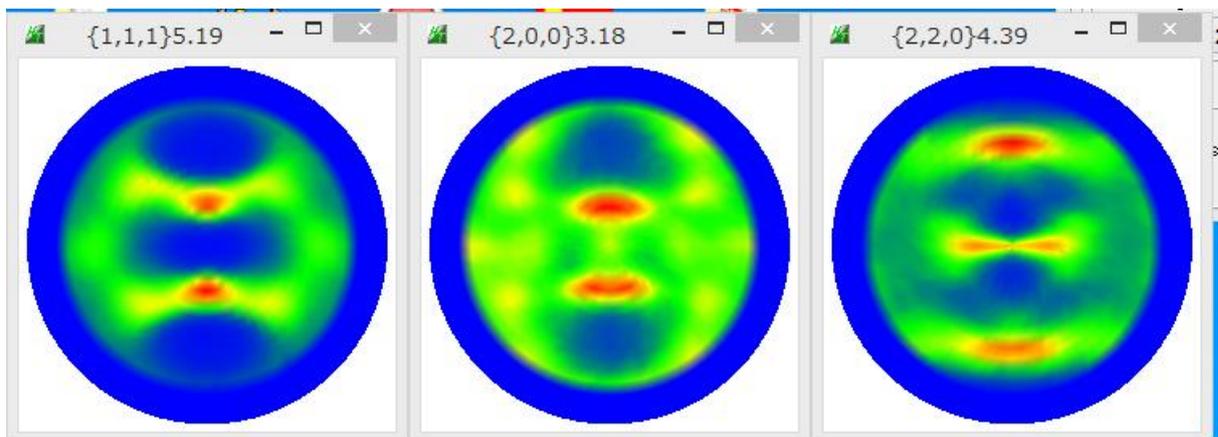
処理結果はAsc(or MAsc)とTXT2

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

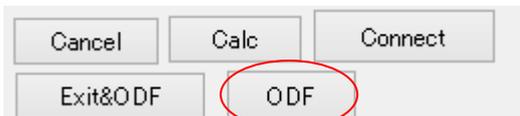
Calcで各種計算が始まり



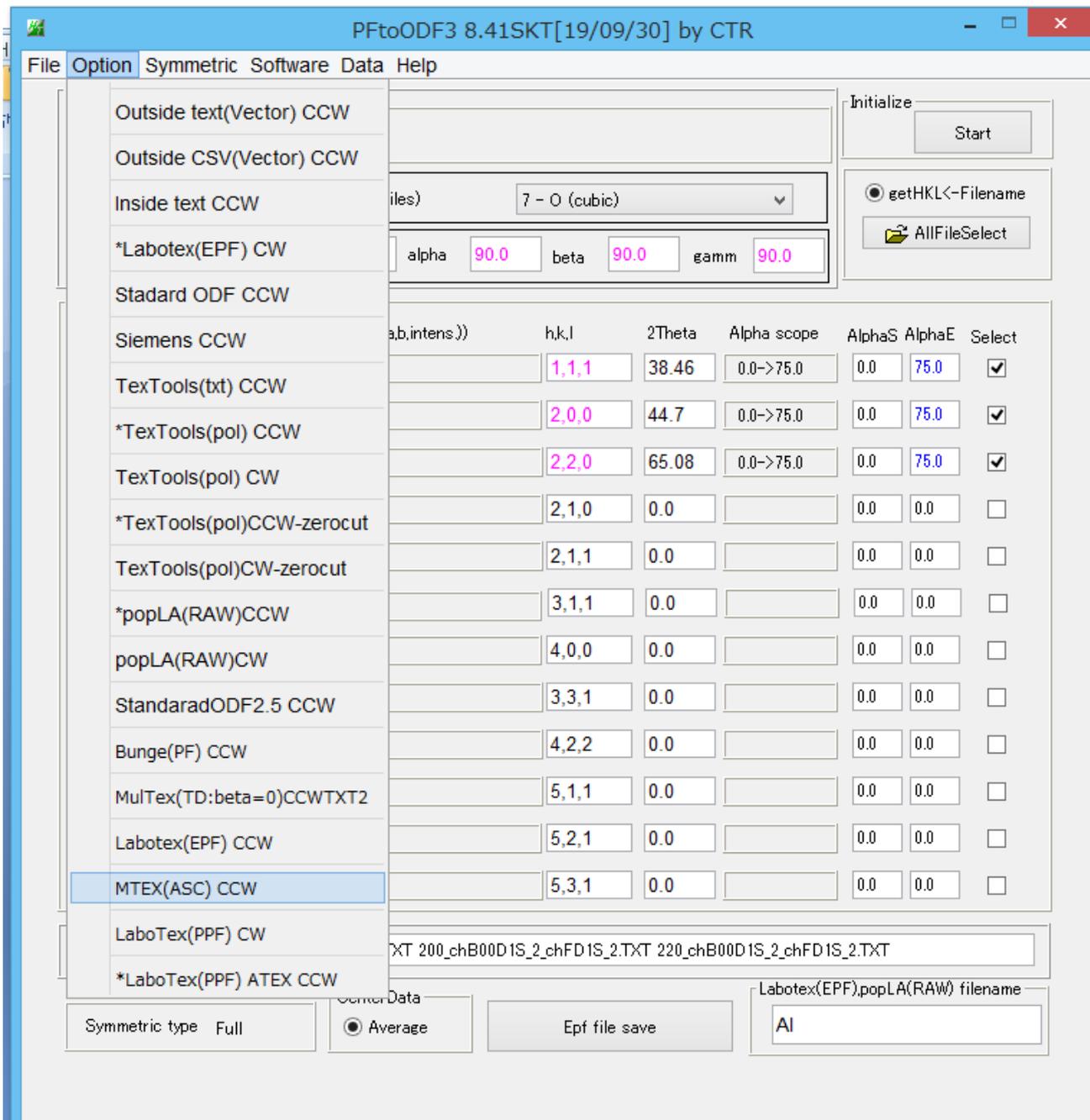
処理された極点図が表示される

```

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

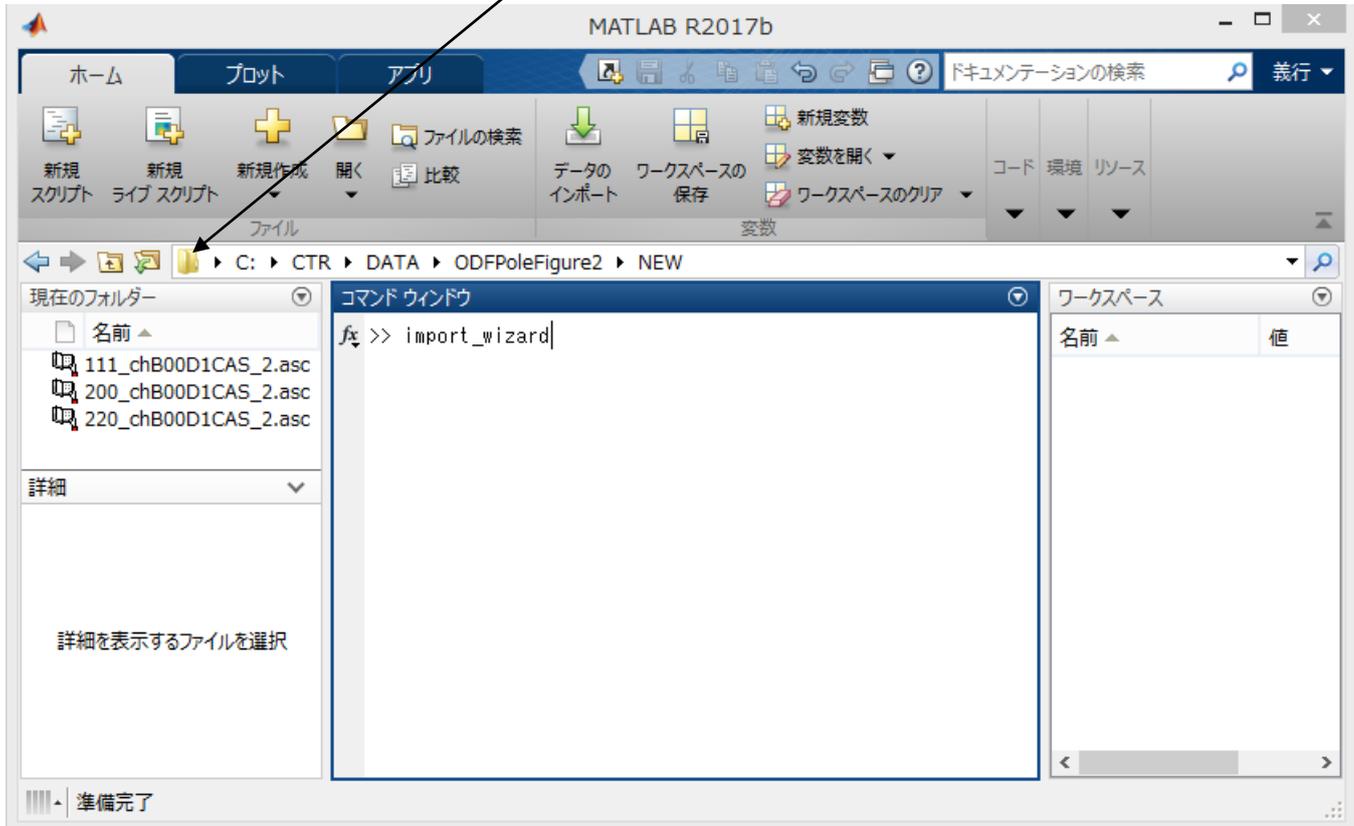


新たにMTEXホルダが作成されMTEX入力データが作成される。

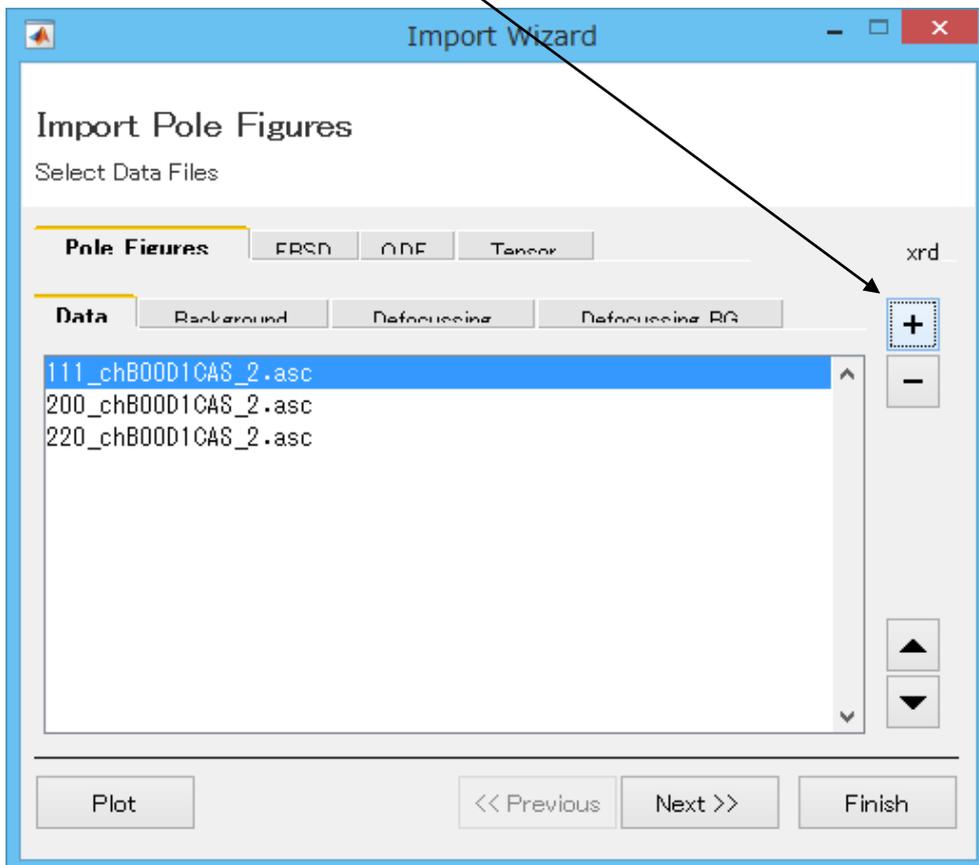


4. MTEXにASCデータを読み込む

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

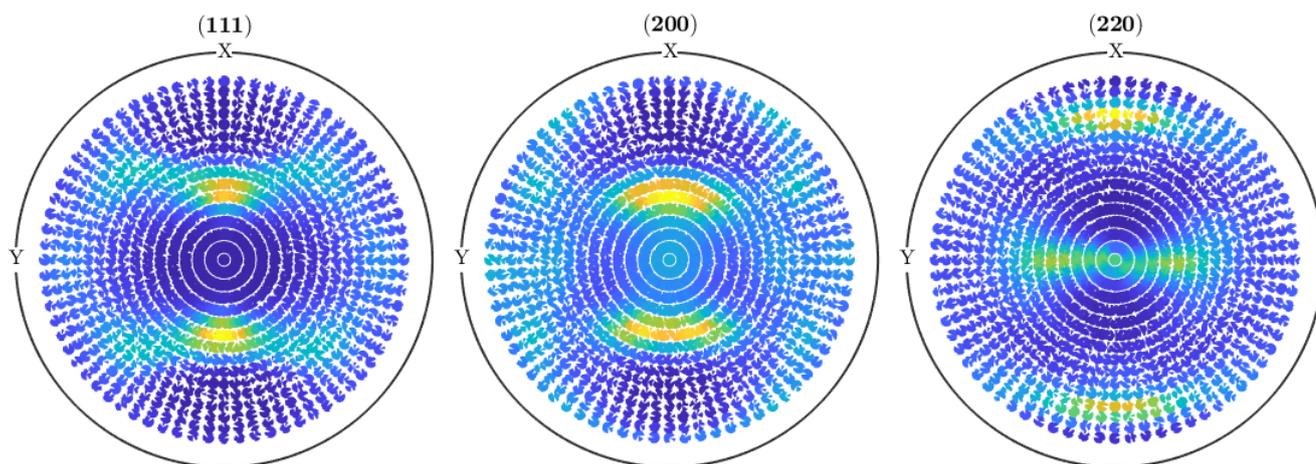
で Aluminum を選択

The screenshot shows the 'Crystal Reference Frame' dialog box. The 'Mineral' section has 'Indexed' selected, 'mineral name' set to 'Aluminum', and 'plotting color' set to 'light blue'. The 'Crystal Coordinate System' section has 'Point Group' set to 'm-3m', and 'Axis Length' (a, b, c) and 'Axis Angle' (alpha, beta, gamma) all set to 90. The 'Next >>' button is circled in red.

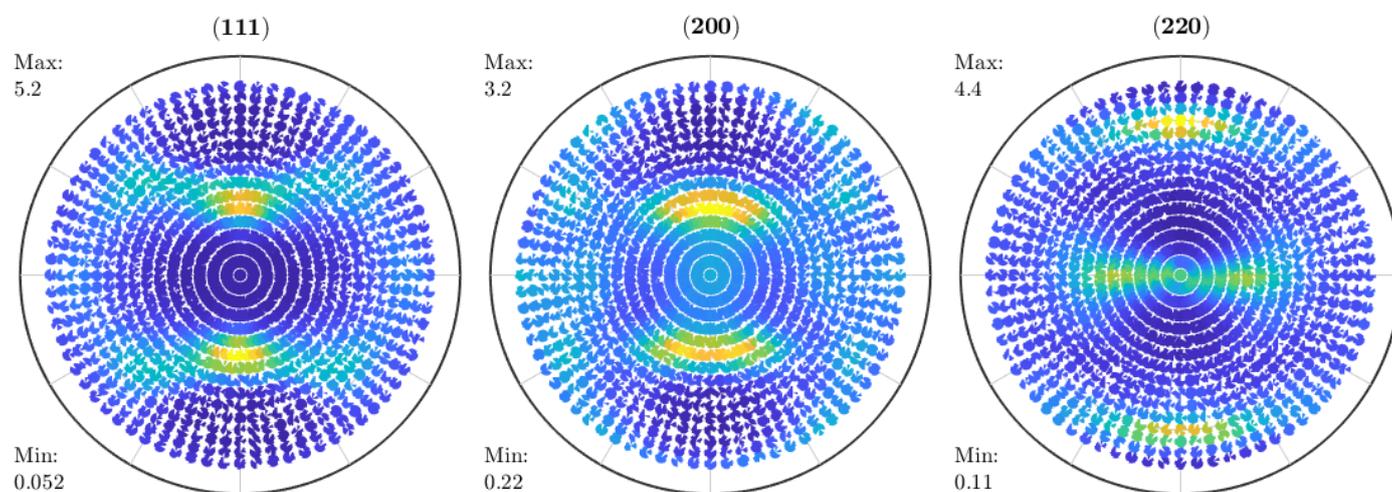
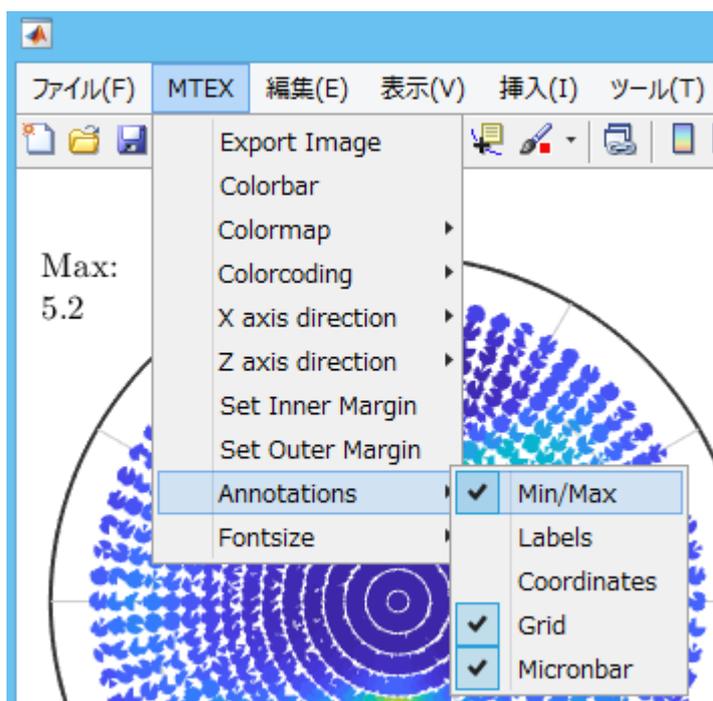
The screenshot shows the 'Specimen Reference Frame' dialog box. The 'Specimen Coordinate System' section has 'rotate data by Euler angles (Bunge) in degree' set to 0, 0, 0 and 'specimen symmetry' set to '-1 triclinic'. The 'MTEX Plotting Convention' section shows eight coordinate system diagrams, with the second one (Y pointing up, X pointing right, Z pointing out) highlighted in blue. Below the diagrams is the text 'Plot ther data to verify that the coordinate system is properly aligned!'. The 'Next >>' button is highlighted with a dashed border.

Plot

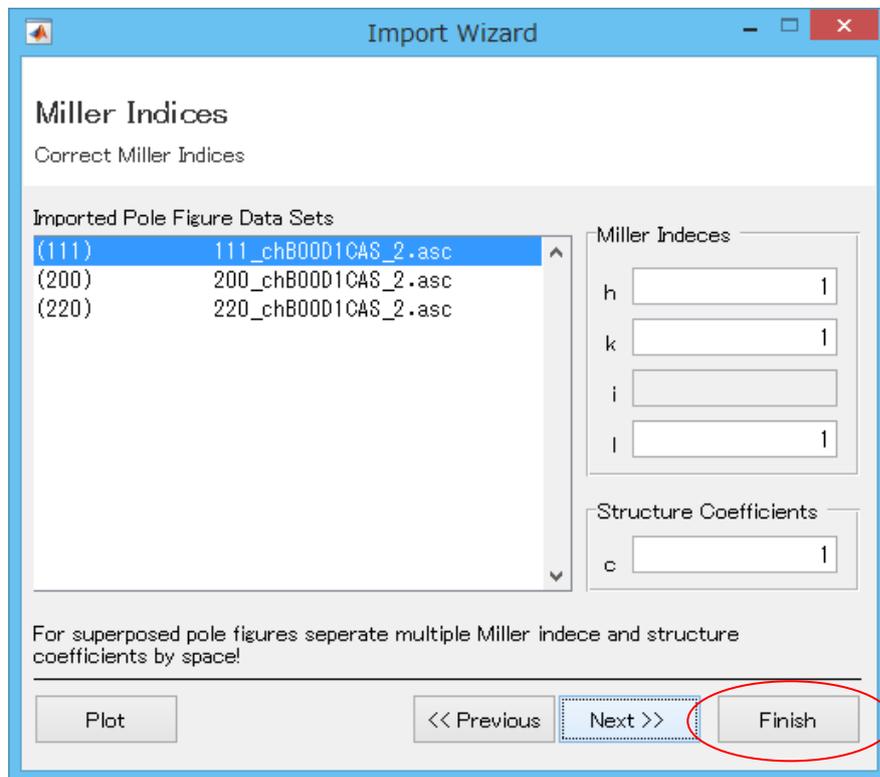
で極点図を確認



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'],...
};

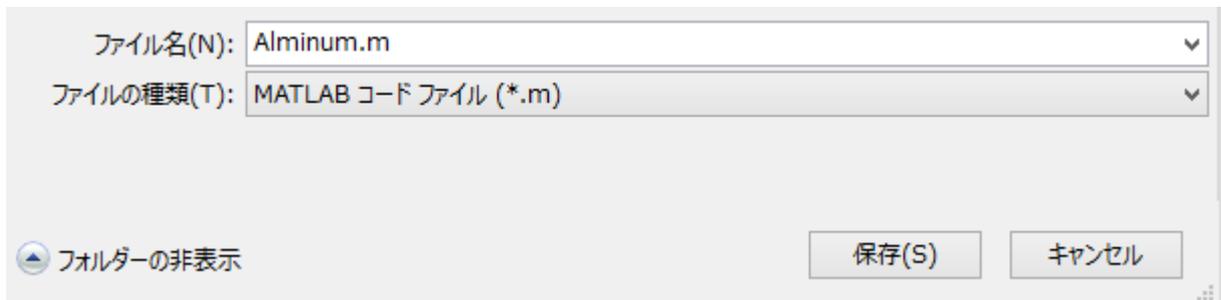
%% Specify Miller Indices

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

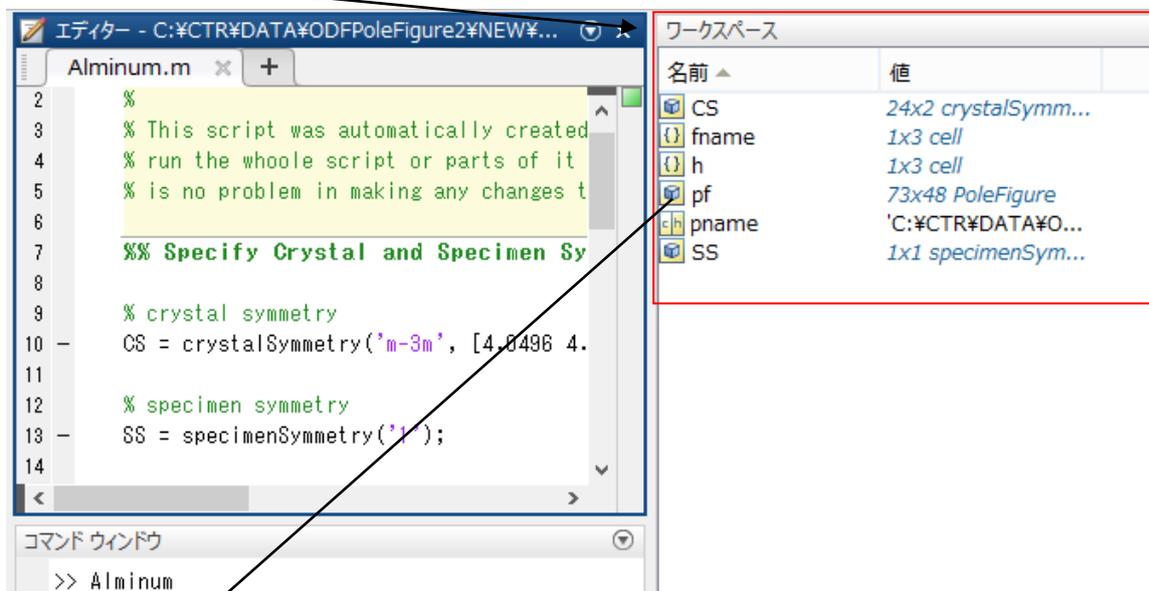
%% Import the Data

% 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

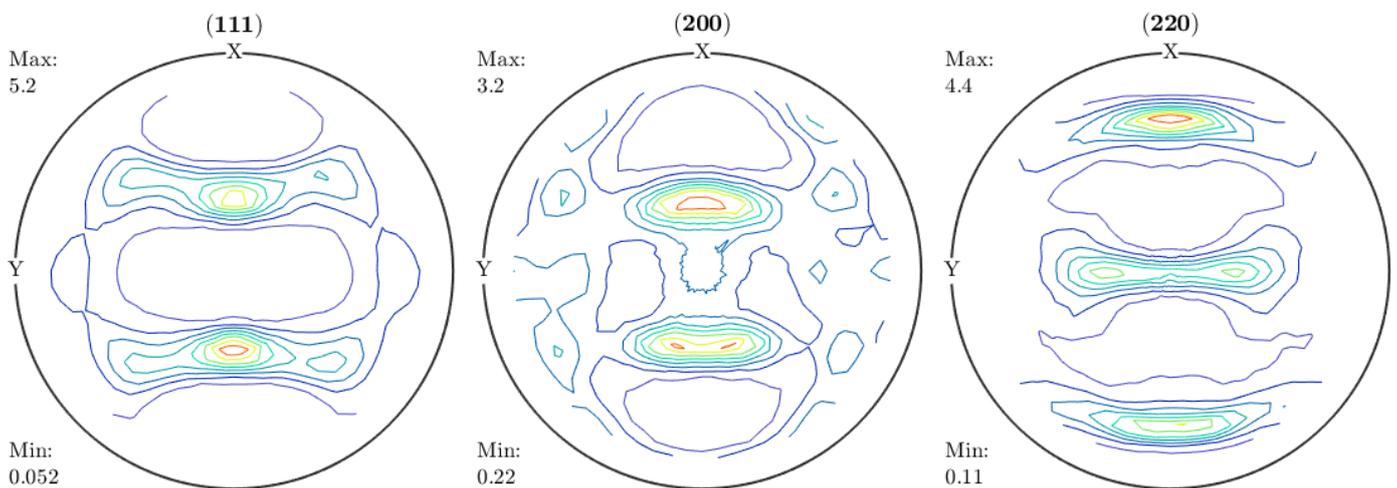


作成されたデータが表示される



極点図を表示

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



p f から ODF の計算

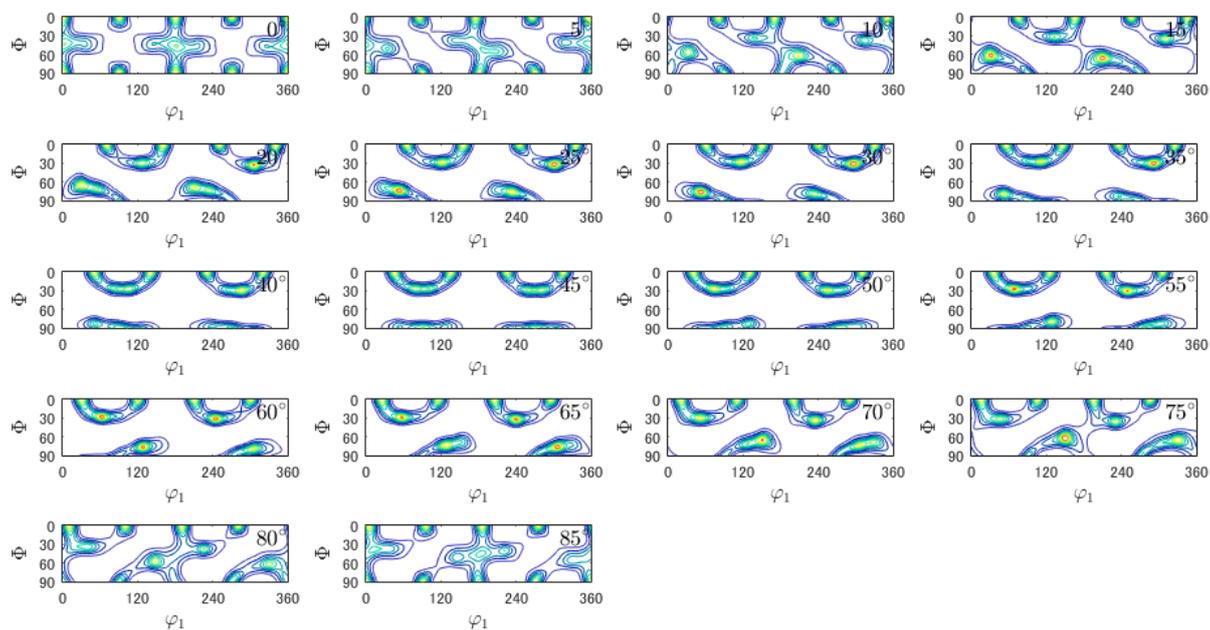
```
>> odf=calcODF(pf)
----- MTEX -- PDF to ODF inversion -----
Call c-routine
initialize solver
start iteration
error: 3.1148E-001 1.1795E-001 3.3280E-002 1.7239E-002 1.3419E-002 1.1554E-002 1.0147E-002 9.1748E-003 8.4108E-003 7.8130E-003 7.3089E-003
Finished PDF-ODF inversion.
error: 7.3089E-003
alpha: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

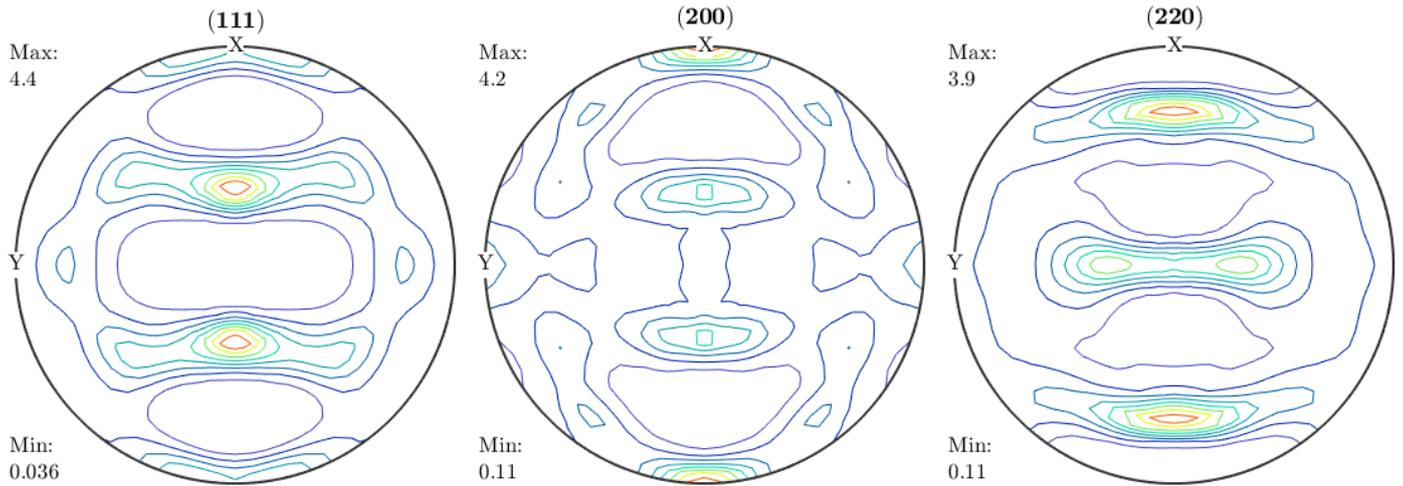
o d f から再計算極点図表示

```
>> 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
```

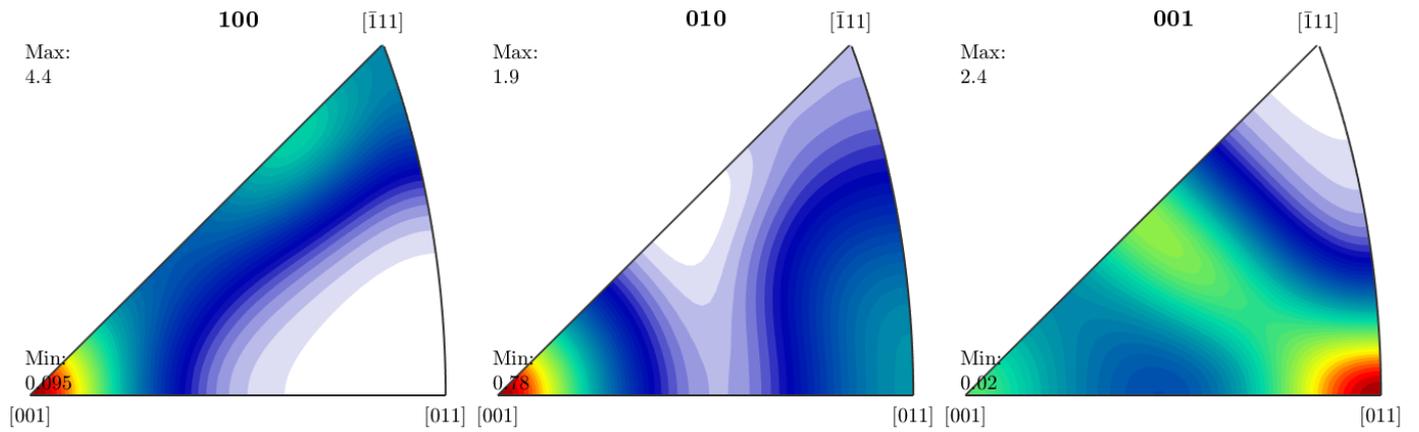
```
x y z
```

```
0 0 1
```

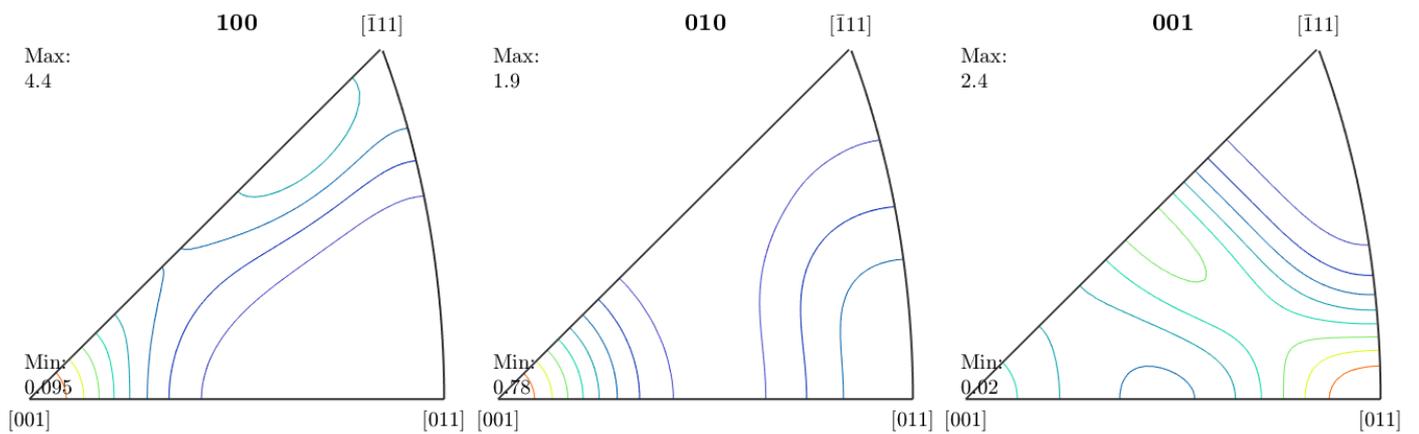
```
0 1 0
```

```
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

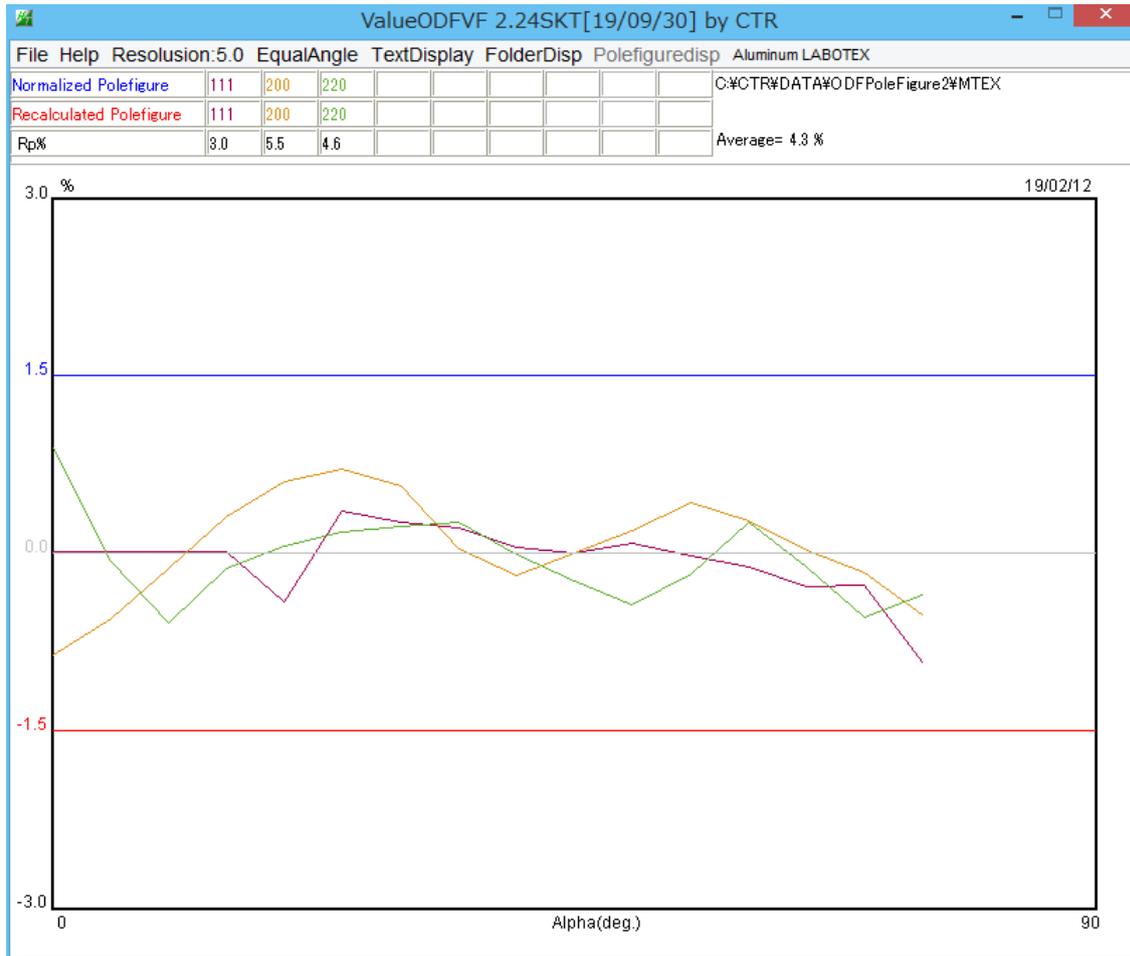
🔊 111R.ASC	2019/02/12 7:31	RINT20007キー	17 KB
🔊 200R.ASC	2019/02/12 7:31	RINT20007キー	17 KB
🔊 220R.ASC	2019/02/12 7:31	RINT20007キー	17 KB
📄 Untitled.m	2019/02/12 7:45	Mファイル	2 KB
📄 ODF.TXT	2019/02/12 7:46	テキスト文書	854 KB
📄 ND.TXT	2019/02/12 7:48	テキスト文書	35 KB
📄 PF_(111).txt	2019/02/12 7:49	テキスト文書	67 KB
📄 PF_(200).txt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

The screenshot displays the MTEX software interface. At the top, three pole figure plots are shown for the {111}, {200}, and {220} planes. Each plot is a circular contour plot with RD (Rolling Direction) and TD (Transverse Direction) axes. The {111} plot has a peak intensity of 4.55, the {200} plot has 4.39, and the {220} plot has 4.07. Below the plots is the MTEXDisplay 1.00ST[19/09/30] by CTR window. A 'File Help' menu is open, showing a 'Select Mtex holder' dialog box. The dialog box contains a folder icon and the path 'C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\MTEX'. Below the dialog box are several buttons: ValueODFVF, GPPoleDisplay, GPInverseDisplay, ODFDisplay2, GPODFDisplay, and hkluvwlistDisplay. A blue rectangular area is visible on the right side of the screenshot.

ValueODFVF

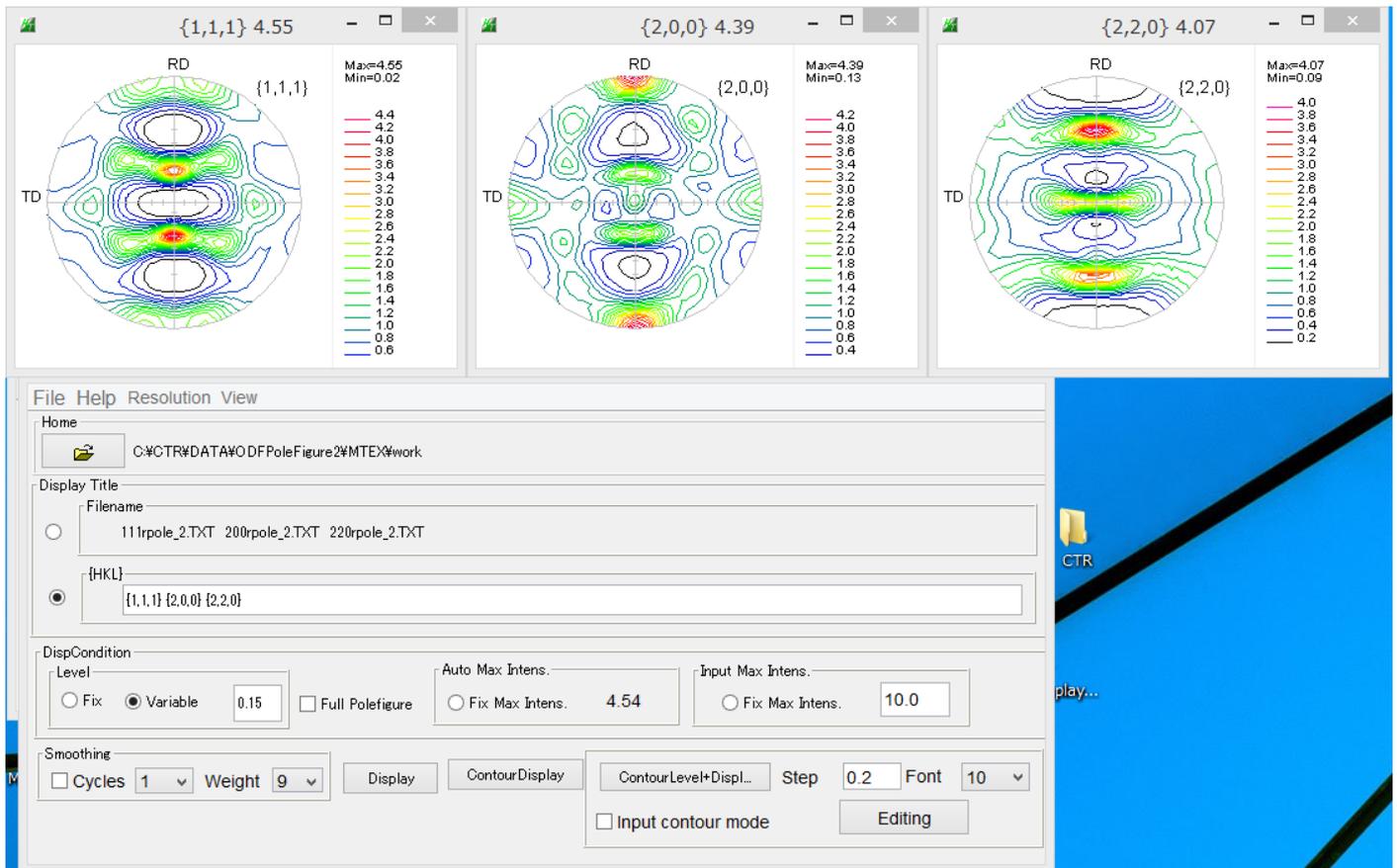
で入力データのE r r o r 評価



± 1.5%以内でほぼ正常である。

GPPoleDisplay

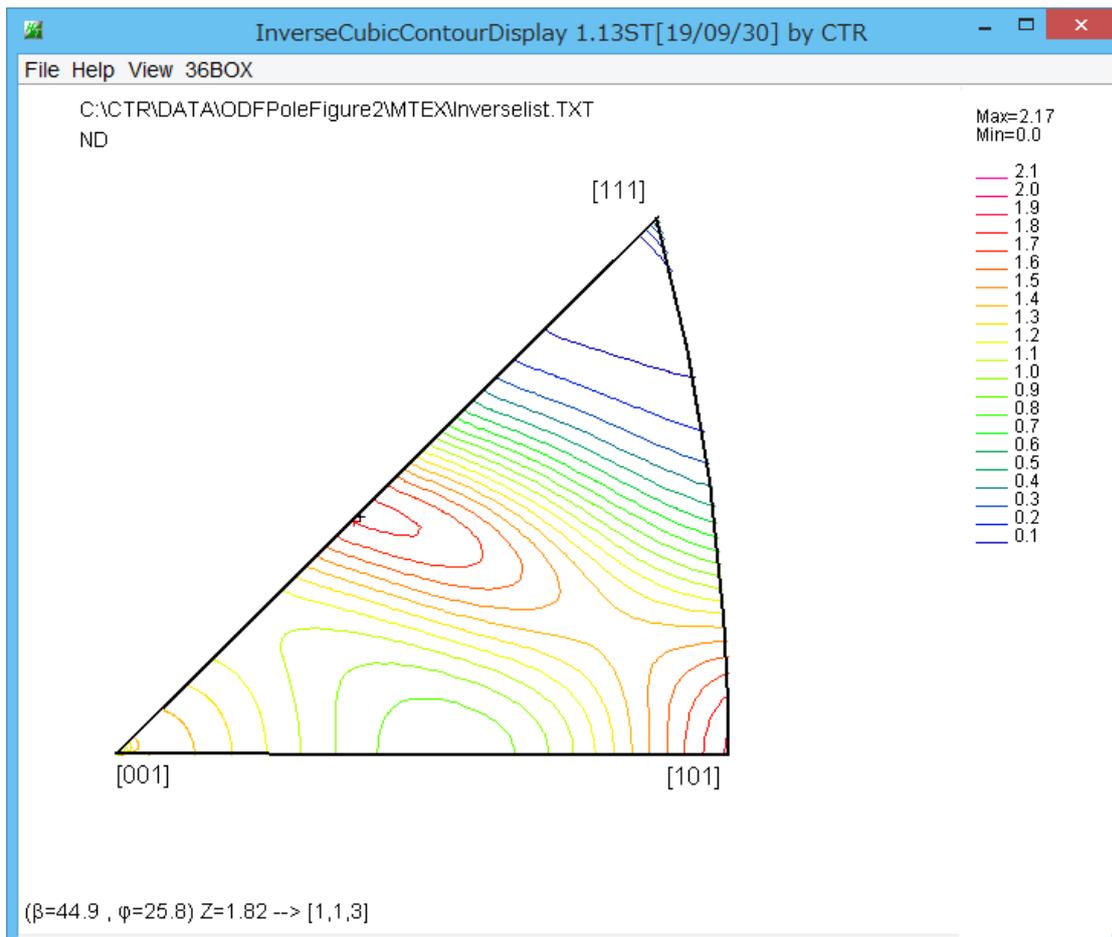
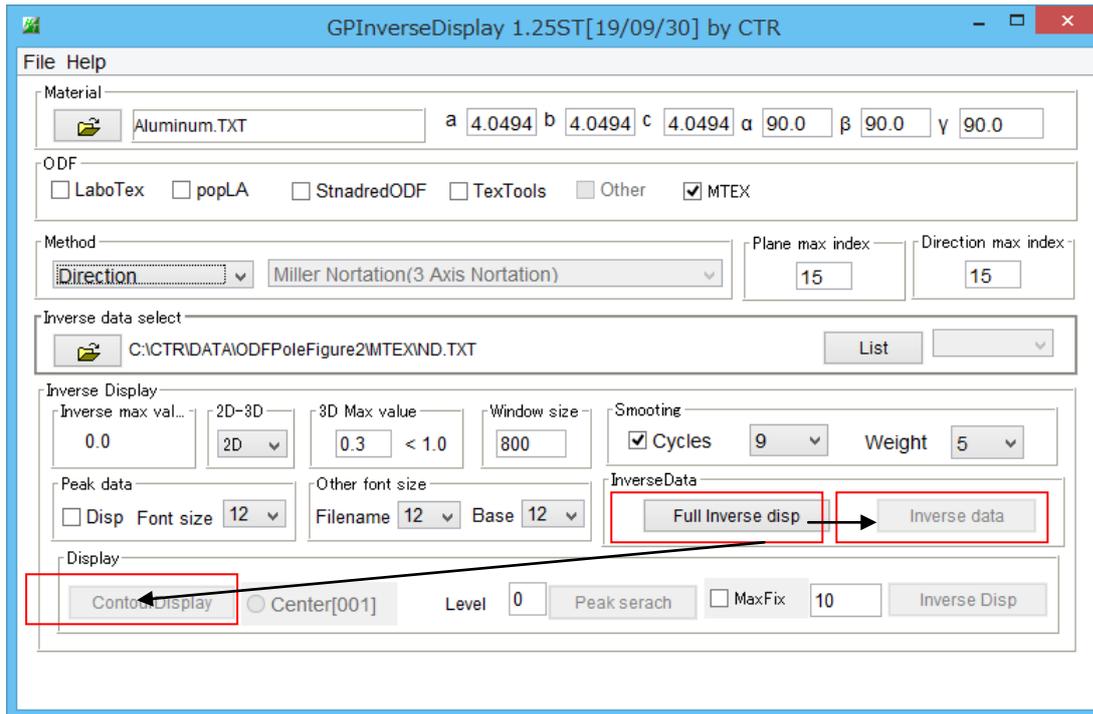
で極点図表示



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

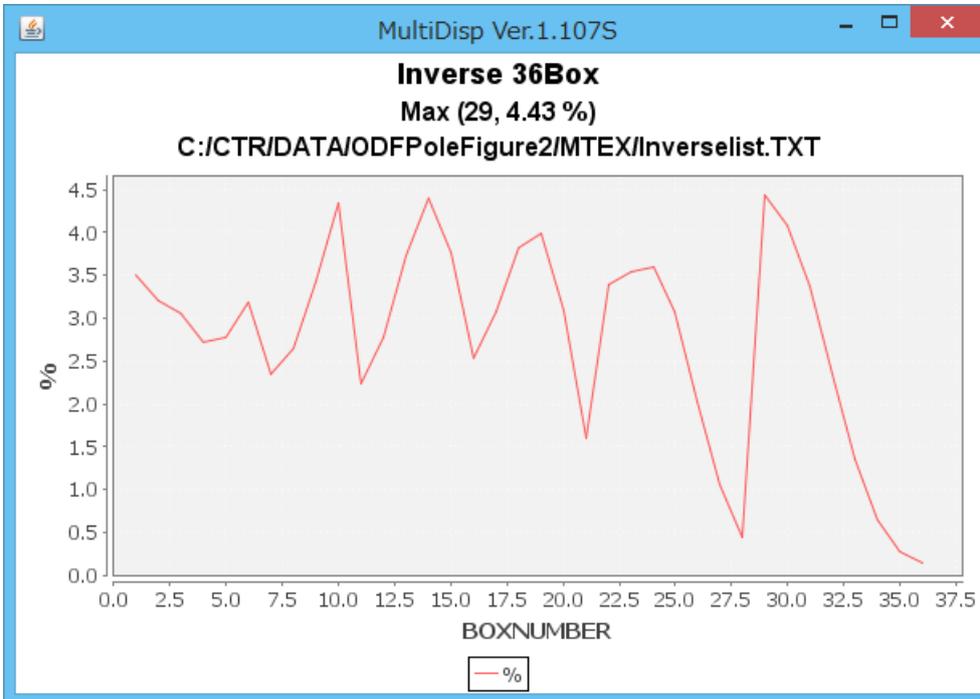
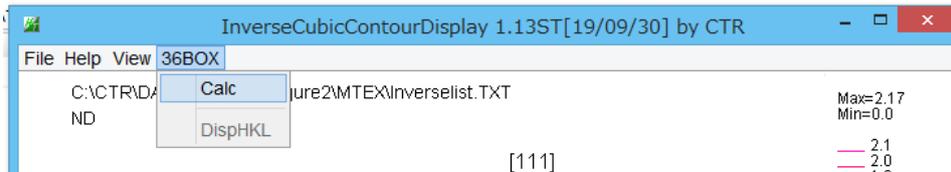
で逆極点図表示



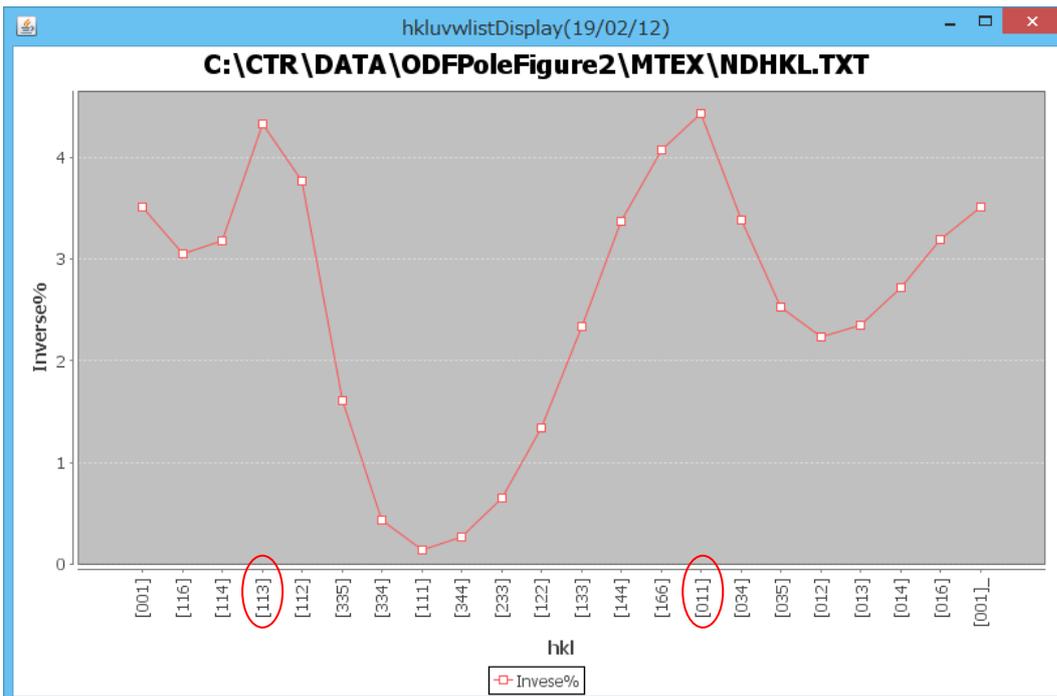
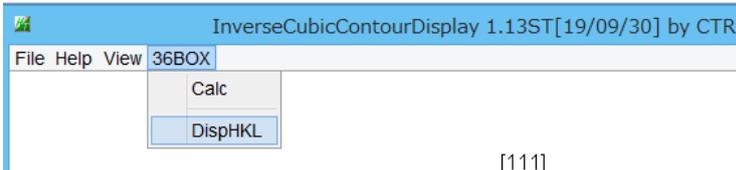
この逆極点図から CTR ソフトウェアの各種処理が利用可能

逆極点プロファイル

36 BOXの定量

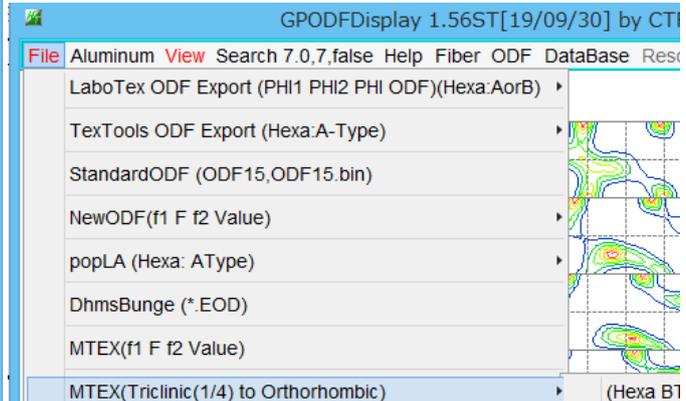
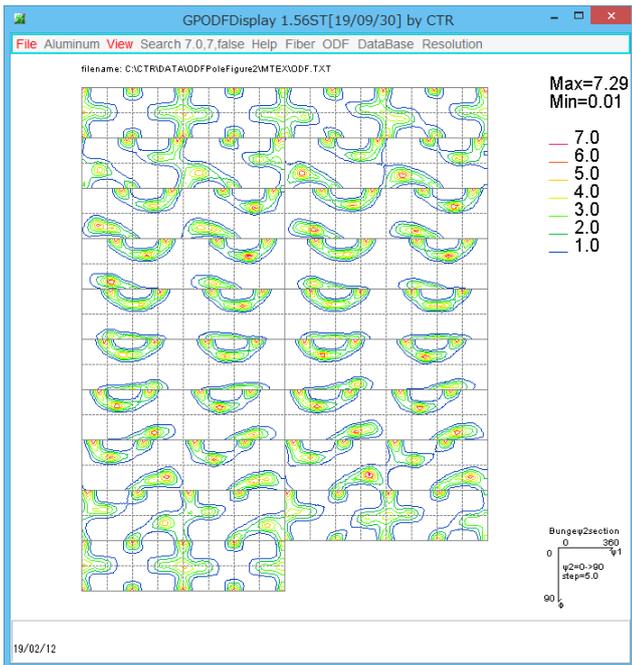


36 Boxから逆極点図外周部分の方位で表示



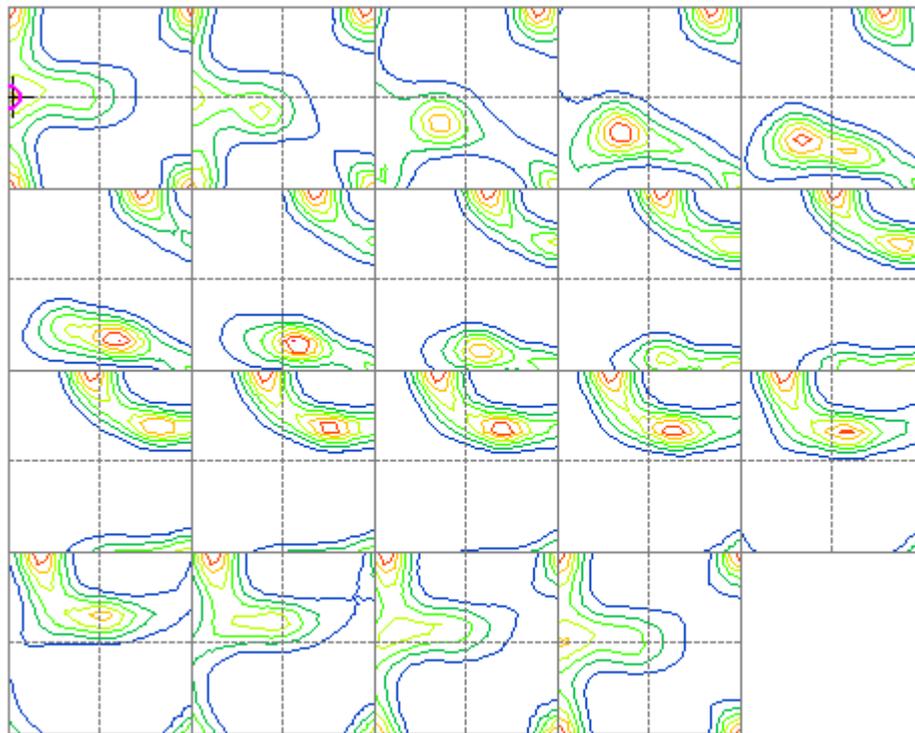
GPODFDisplay

でODF図表示



Triclinic \rightarrow Orthorhombic を行う

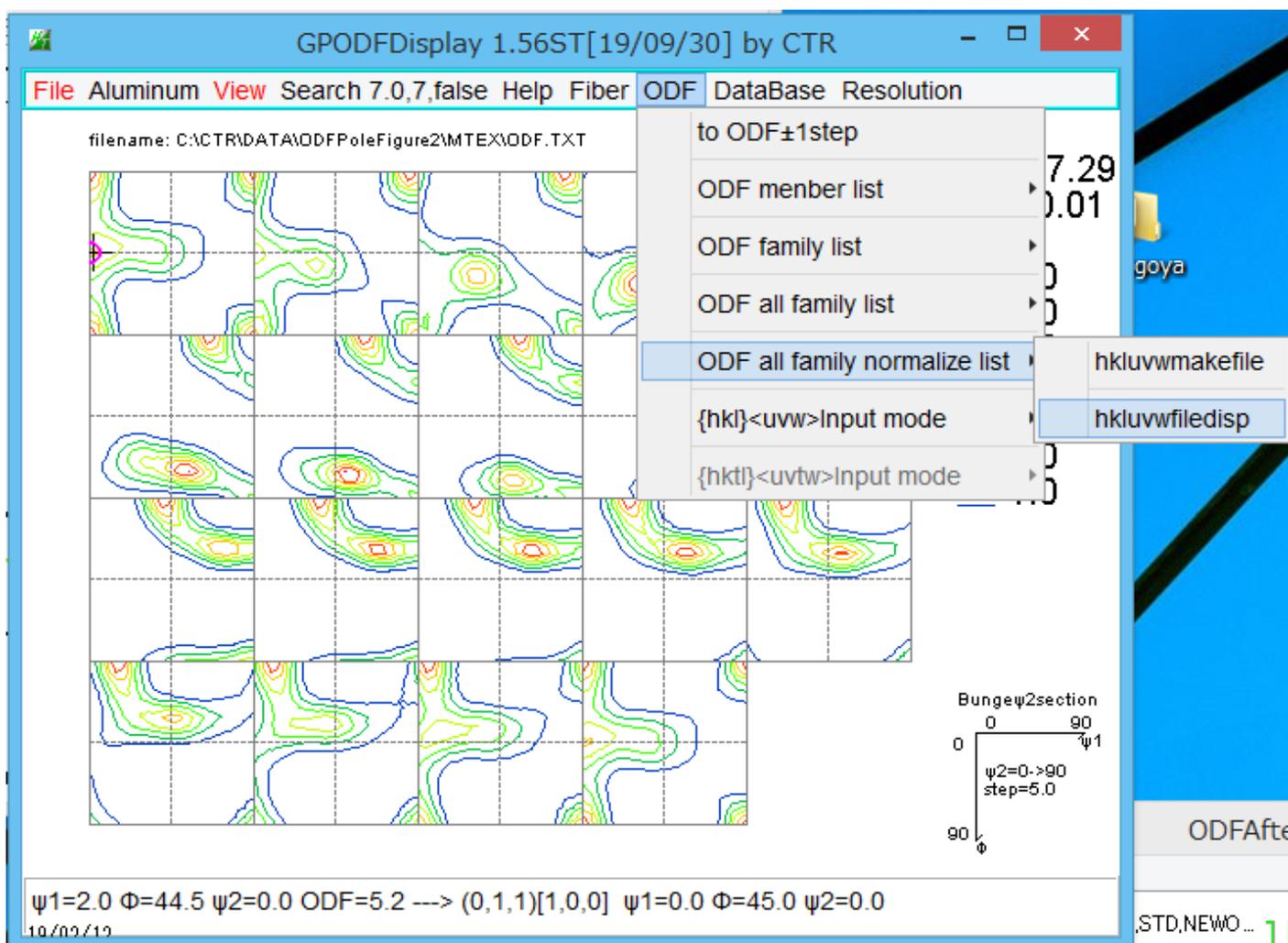
filename: C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\MTEX\ODF.TXT



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

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

