

EBSDAngdataMakerによるCubicODF解析調査

MTEXで`halfwidth=2deg`以下にするとLaboTexと同一なODF図が描画できる。

本資料作成時、EBSDAngMakerに`cif-symmetrized`に対応

AngデータをEBSDtoLaboTexへ読み込み時

格子定数、LaboTexStructureCode取り込み

SpaseG.TXTに追加修正を行っています。

2021年01月07日

HelperTex Office

概要

非対称ODF解析に対し、L a b o T e xでは、以下のC o d eで扱っている。

Symmetry		Cubic**		Hexagonal		Tetragonal		Trigonal		Ortho- rhombic	Mono- clinic	Triclinic
		Θ	T	D_6	C_6	D_4	C_4	D_3	C_3	D_2	C_2	C_1
LaboTex structure code		7	6	11	10	5	4	9	8	3	2	1
ϕ_1	triclinic* (C_1)	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°
	monoclinic* (C_2)	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°
	orthorhombic* (D_2)	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°
	axial*	***	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Φ		90°	90°	90°	180°	90°	180°	90°	180°	90°	180°	180°
ϕ_2		90°	180°	60°	60°	90°	90°	120°	120°	180°	180°	360°

* - sample symmetry

** - there are three non-linear basic region inside described region

*** - for any ϕ_1 angle

XRDデータでは、C u b i cに対し、O - C u b i cを優先していた。

E B S D A n g d a t a M a k e rでデータを作成し、ODF図の比較を行ってみます。

入力データをアルミニウムとする。

```

_pd_phase_name
_cell_length_a
_cell_length_b
_cell_length_c
_cell_angle_alpha
_cell_angle_beta
_cell_angle_gamma
_symmetry_space_group_name_H-M
_symmetry_Int_Tables_number

```

'Al' ↓
4.04958(3) ↓
4.04958(3) ↓
4.04958(3) ↓
90 ↓
90 ↓
90 ↓
'F m -3 m' ↓
225 ↓

Material

Materi... cif Symmetry number 43 Materialname Al

LatticeConstants 4.04958 4.04958 4.04958 90.0 90.0 90.0

M T E X 付 属 c i f データ

```

_space_group_IT_number
_symmetry_space_group_name_Hall
_symmetry_space_group_name_H-M
_[local]_cod_cif_authors_sg_H-M

```

225 ↓
'-F 4 2 3' ↓
'F m -3 m' ↓
'F m 3 m' ↓

```

_chemical_name_mineral
_cell_angle_alpha
_cell_angle_beta
_cell_angle_gamma
_cell_length_a
_cell_length_b
_cell_length_c

```

Aluminum ↓
90 ↓
90 ↓
90 ↓
4.04958 ↓
4.04958 ↓
4.04958 ↓

Material

Materi... cif Symmetry number 43 Materialname Aluminum

LatticeConstants 4.04958 4.04958 4.04958 90.0 90.0 90.0

S p a s eコードからS y m m e t r y変換はS p a s e G. T X Tファイルを参照しています。

Ang データ作成

EBSDAngdataMaker 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

Material

Materi... **cif** Symmetry number **43** Materialname **Al**

LatticeConstants **4.04958** **4.04958** **4.04958** **90.0** **90.0** **90.0**

GRID: SqrGrid#

Number **20** 400

Data eulerangle(f1,F,f2) angles

<input checked="" type="checkbox"/> 1	200	30	0.000	<input checked="" type="checkbox"/> 2	300	60	0.000
<input type="checkbox"/> 3	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 4	0.000	0.000	0.000
<input type="checkbox"/> 5	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 6	0.000	0.000	0.000
<input type="checkbox"/> 7	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 8	0.000	0.000	0.000
<input type="checkbox"/> 9	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 10	0.000	0.000	0.000

Makefileholder

U:\2021-01-07-cube\Al\Al.ang

makefile

Ang データ

TextDisplay 1.14S U:\2021-01-07-cube\Al\Al.ang

File Help

```
#
# Phase 1
# MaterialName    Al
# Formula
# Symmetry        43
# LatticeConstants 4.04958 4.04958 4.04958 90.0 90.0 90.0
#
# GRID: SqrGrid#
3.491 0.524 0.000 0.000 0.000 1.000 1.000 1 1
5.236 1.047 0.000 1.000 0.000 1.000 1.000 1 1
0.000 0.000 0.000 2.000 0.000 1.000 1.000 0 1
```

MT E X解析手順

Import_wizard

Import Wizard

Import EBSD

Select Data Files

Pole Figures EBSD ODF Tensor ang

Al .ang

Plot << Previous Next >> Finish

Import Wizard

Crystal Reference Frame for Phase 0

Crystal Symmetry

Mineral

☐ Indexed ☒ Not Indexed

mineral name notIndexed Load Cif File

plotting color

Crystal Coordinate System

Point Group 1

Axis Length a b c

Axis Angle alpha beta gamma

Plot << Previous Next >> Finish

Import Wizard

Crystal Reference Frame for Phase 1

Crystal Symmetry

Mineral

☒ Indexed ☐ Not Indexed

mineral name Al Load Cif File

plotting color

Crystal Coordinate System

Point Group 432

Axis Length a 4.04958 b 4.04958 c 4.04958

Axis Angle alpha 90 beta 90 gamma 90

Plot << Previous Next >> Finish

Import Wizard

Specimen Reference Frame

Specimen Symmetry

Specimen Coordinate System

rotate data by Euler angles (Bunge) in degree 0 0 0

☐ apply rotation to Euler angles and spatial coordinates

☐ apply rotation only to Euler angles

☐ apply rotation only to spatial coordinates

☒ use ANG interface flag 'convertSpatial2EulerReferenceFrame'

☐ use ANG interface flag 'convertEuler2SpatialReferenceFrame'

MTEX Plotting Convention

Plot the data to verify that the coordinate system is properly aligned!

Plot << Previous Next >> Finish

Import Wizard

Import Data

Select Method

Summary of EBSD data to be imported:

phase 0 (not Indexed): notIndexed, 398 orientations

phase 1 (Al): symmetry 432, 2 orientations

Import to

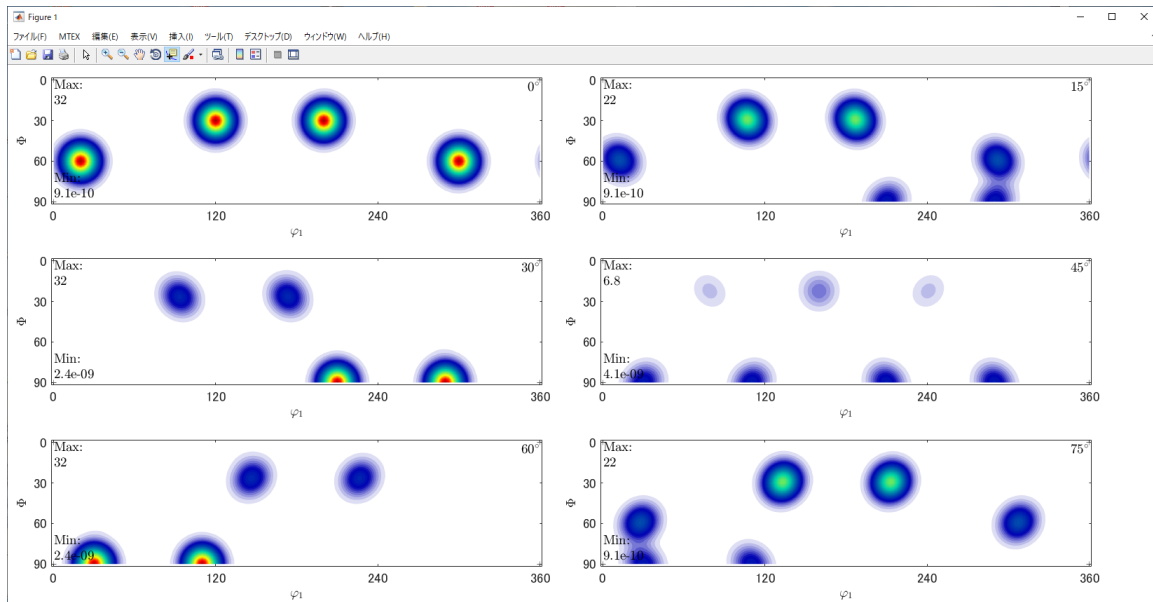
☒ script (m-file) ☐ workspace variable

Plot << Previous Next >> Finish

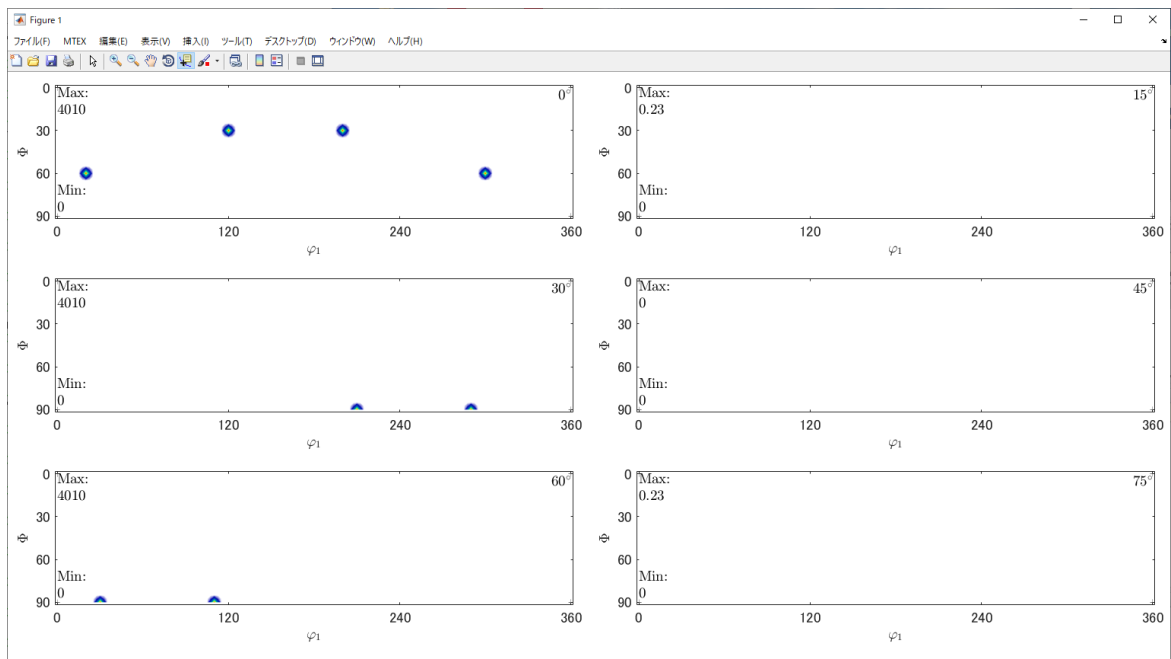


MT E Xで解析結果

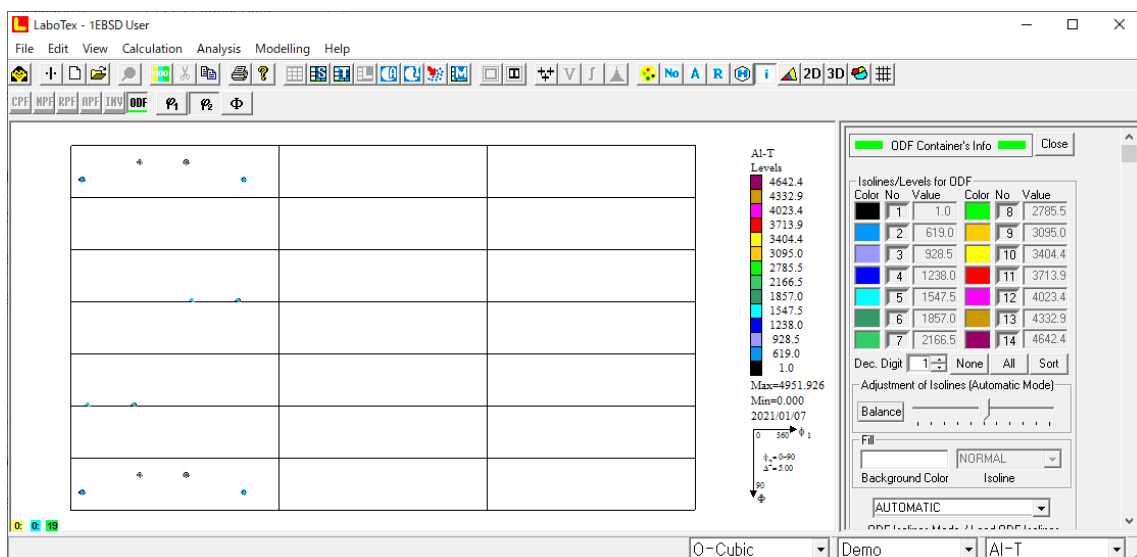
odf = calcDensity(ebsd('Al').orientations)



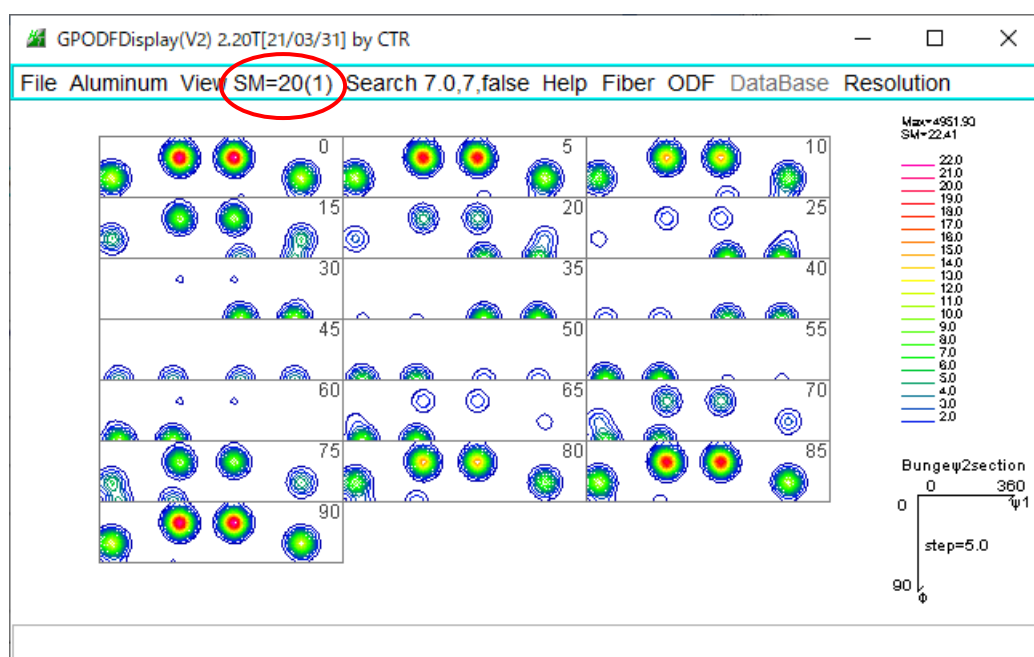
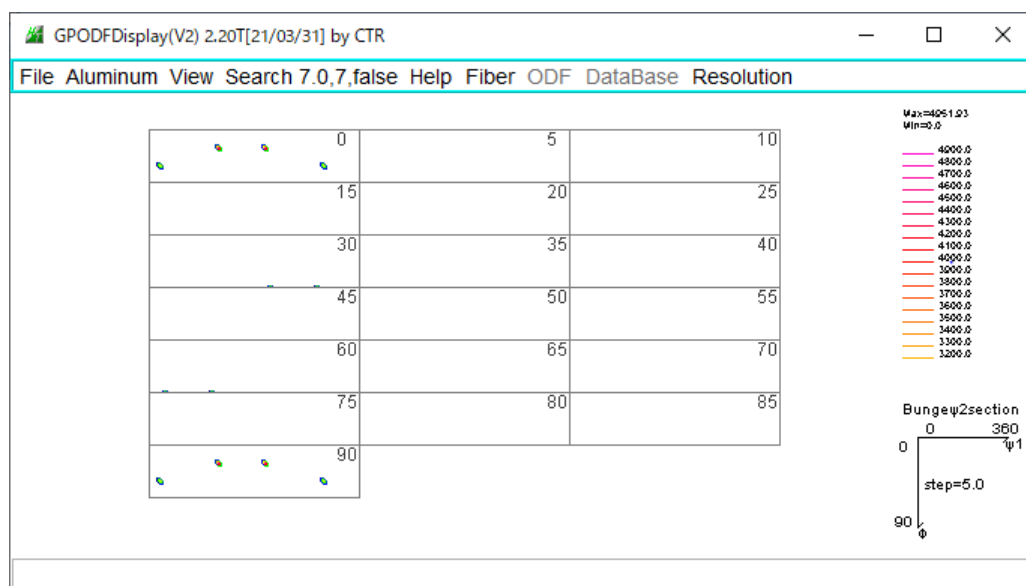
odf = calcDensity(ebsd('Al').orientations,'halfwidth',2*degree)



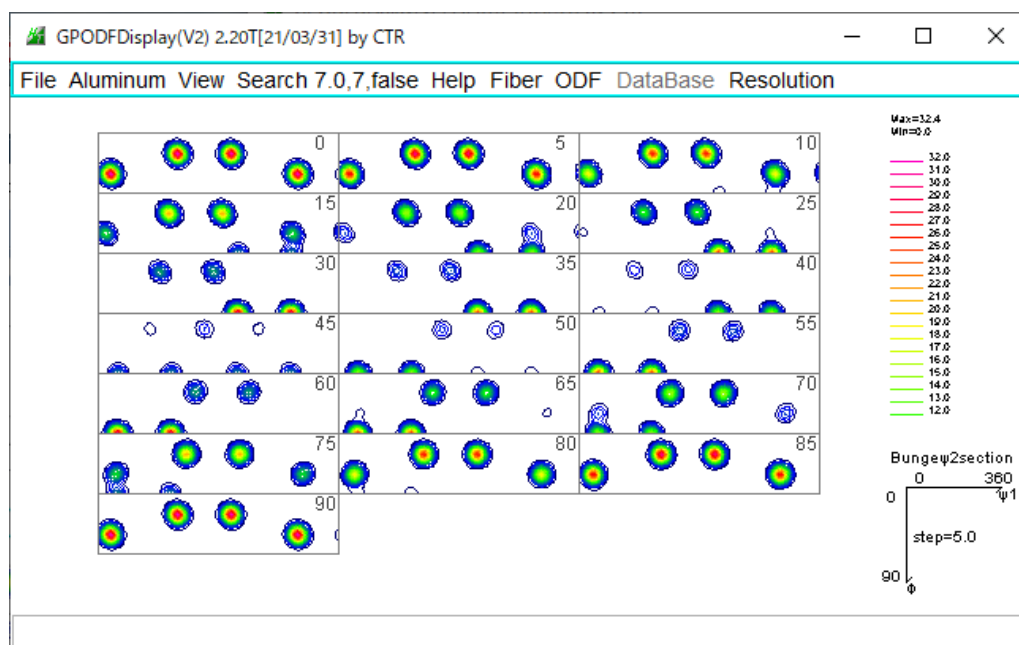
L a b o T e xで解析



L a b o T e x データから MTEX(halfwidth=10deg)と似た図を得るに平滑化を行います。



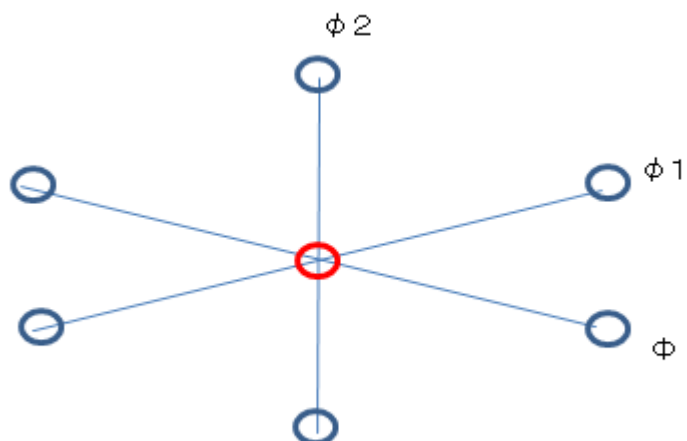
MTEX (Halfwidth=10deg)



GPODFDisplayの平滑化 (3D-cube Smoothing)

Euler空間の3次元平滑をパラメータ, `cycle`と`weight`で行います。

赤丸位置の平滑化は、 $\phi 1$ 方向、 Φ 方向、 $\phi 2$ 方向の6点と赤丸に`weight`を付けて移動加算平均値を`cycle`回繰り返します。



MTEXの広がりを再現するために利用します。1Cycle毎に1Step広がります。

P 2 3 の S i O 2 では

```
data_SiO2↓
_symmetry_space_group_name_H-M P23↓
_cell_length_a 8.79332600↓
_cell_length_b 8.79332600↓
_cell_length_c 8.79332600↓
_cell_angle_alpha 90.00000000↓
_cell_angle_beta 90.00000000↓
_cell_angle_gamma 90.00000000↓
_symmetry_Int_Tables_number 195↓
_chemical_formula_structural SiO2↓
_chemical_formula_sum 'Si12 O24'↓
cell volume 679.92267194↓
```

EBSDAngdataMaker 1.00T[21/03/31] by CTR

File Help

Material

Materi... cif Symmetry number 23 Materialname SiO2

LatticeConstants 8.793326 8.793326 8.793326 90.0 90.0 90.0

GRID: SqrGrid#

Number 20 400

Data eulerangle(f1,f2) angles

<input checked="" type="checkbox"/> 1	30	160	0.000	<input checked="" type="checkbox"/> 2	350	70	0.000
<input type="checkbox"/> 3	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 4	0.000	0.000	0.000
<input type="checkbox"/> 5	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 6	0.000	0.000	0.000
<input type="checkbox"/> 7	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 8	0.000	0.000	0.000
<input type="checkbox"/> 9	0.000	0.000	0.000	<input type="checkbox"/> 10	0.000	0.000	0.000

Makefileholder U:\2021-01-07-cube%SiO2%SiO2.ang

makefile

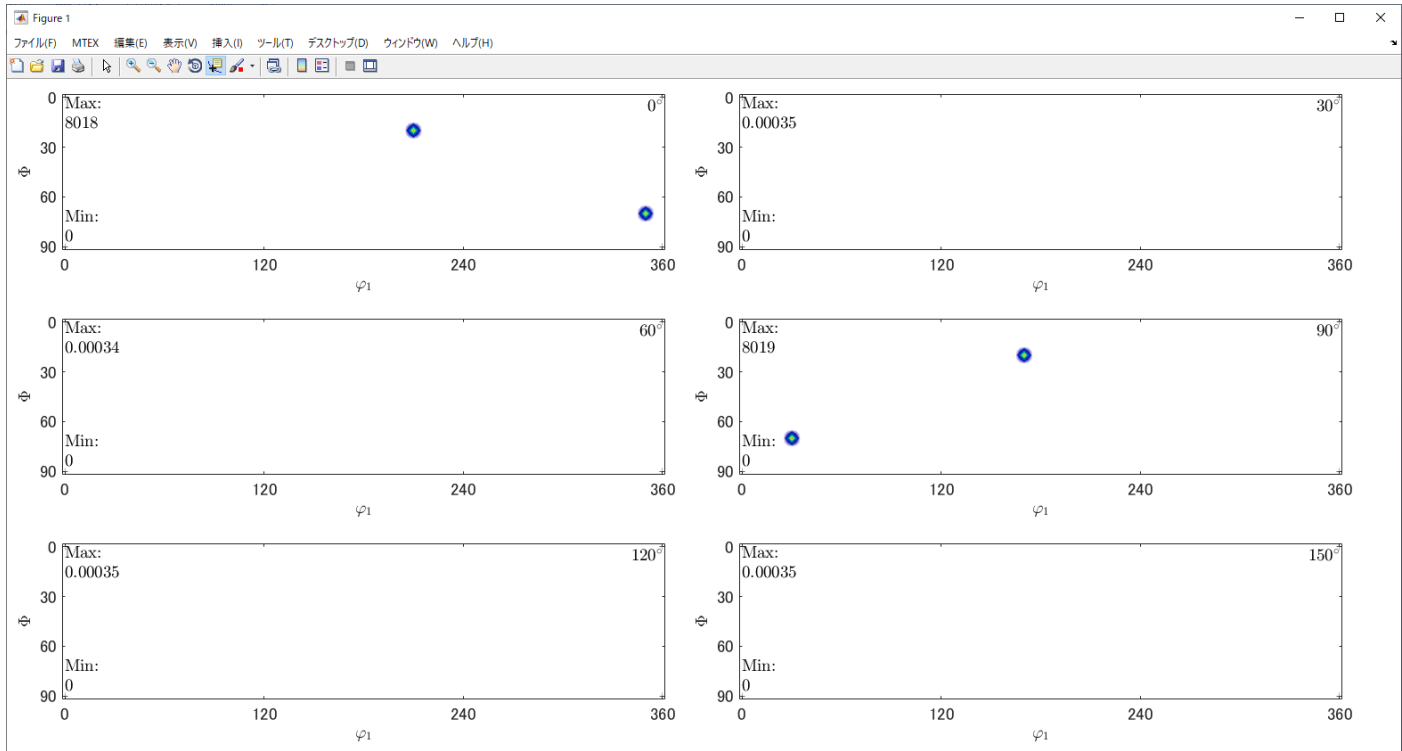
TextDisplay 1.14S U:\2021-01-07-cube%SiO2%SiO2.ang

File Help

```
#
at # Phase 1
1 # MaterialName SiO2
1 # Formula
2 # Symmetry 23
2 # LatticeConstants 8.793326 8.793326 8.793326 90.0 90.0 90.0
#
# GRID: SqrGrid#
9 0.524 2.793 0.000 0.000 0.000 1.0 1.0 1 1
ve 6.109 1.222 0.000 1.000 0.000 1.0 1.0 1 1
0.000 0.000 0.000 2.000 0.000 1.0 1.0 0 1
```

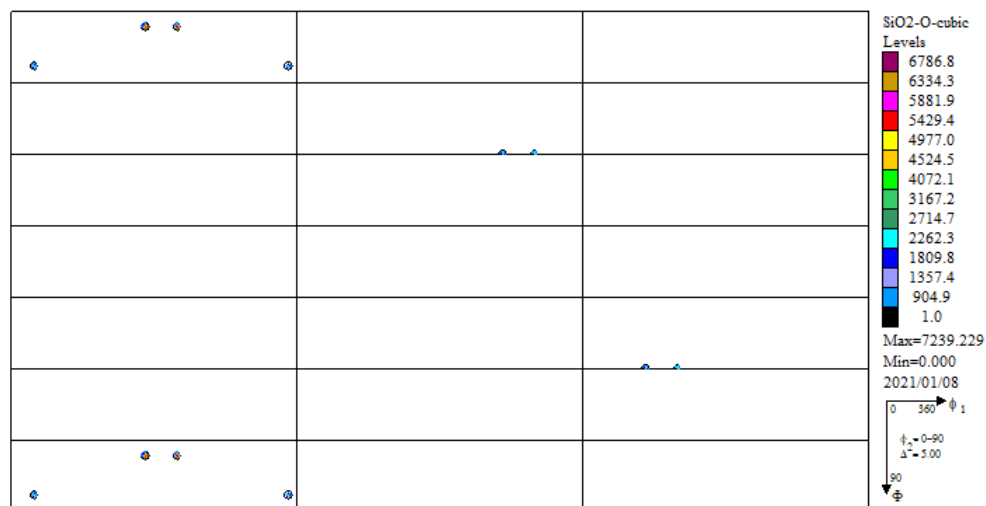


```
odf = calcDensity(ebsd('SiO2').orientations,'halfwidth',2*degree)
```

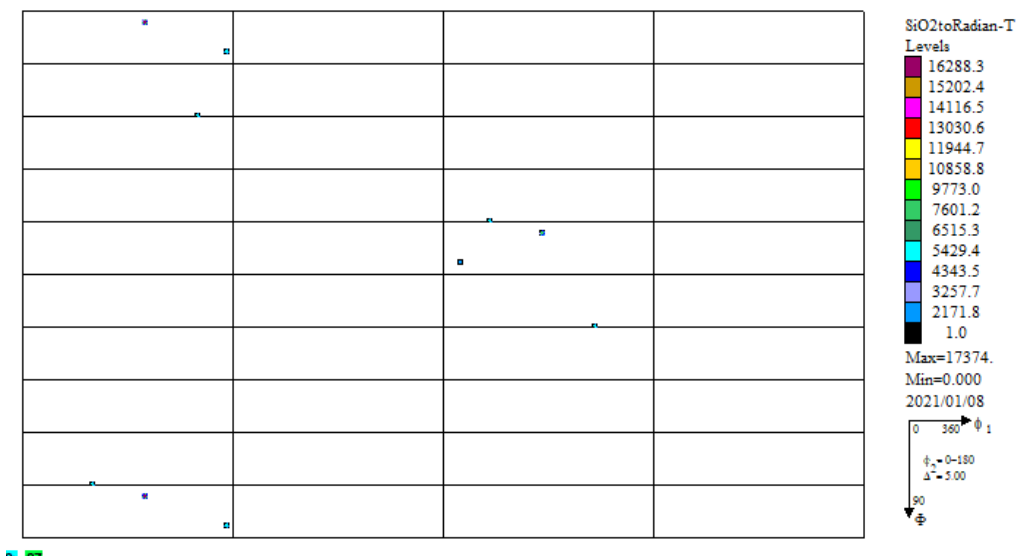


LaboTex

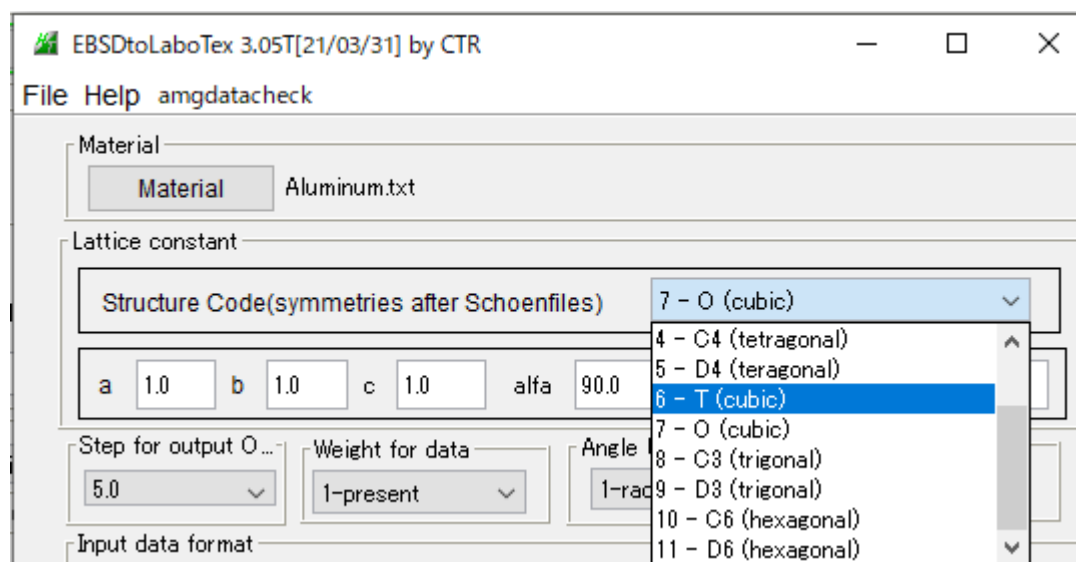
O=Cubic



T-Cubic

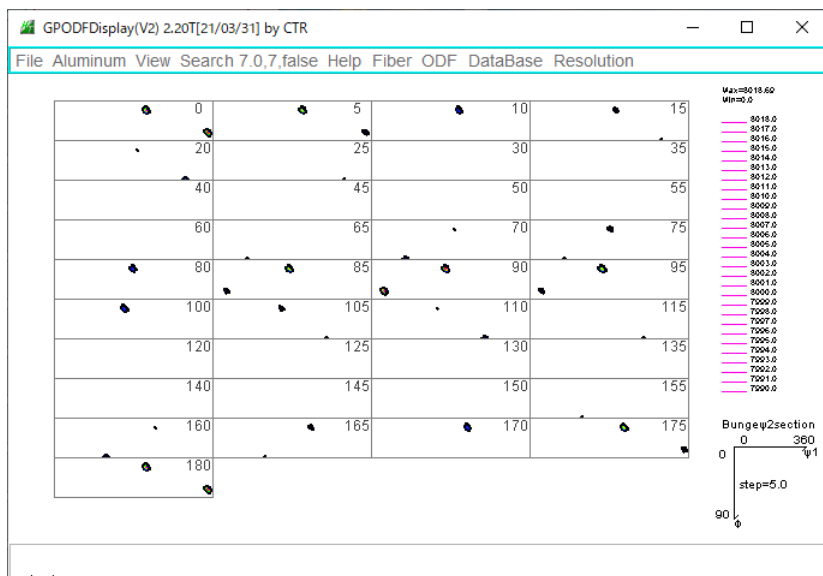


Cubic (P23) はLaboTex T-cubic

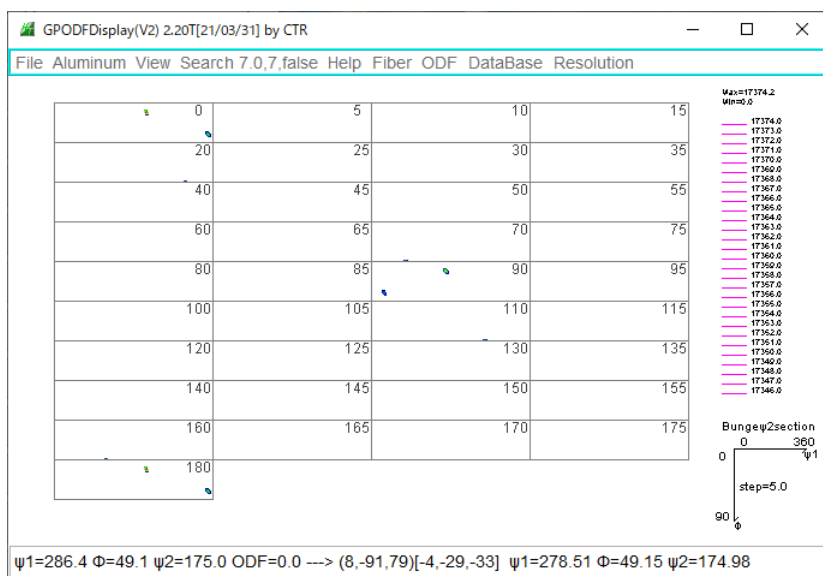


データ比較

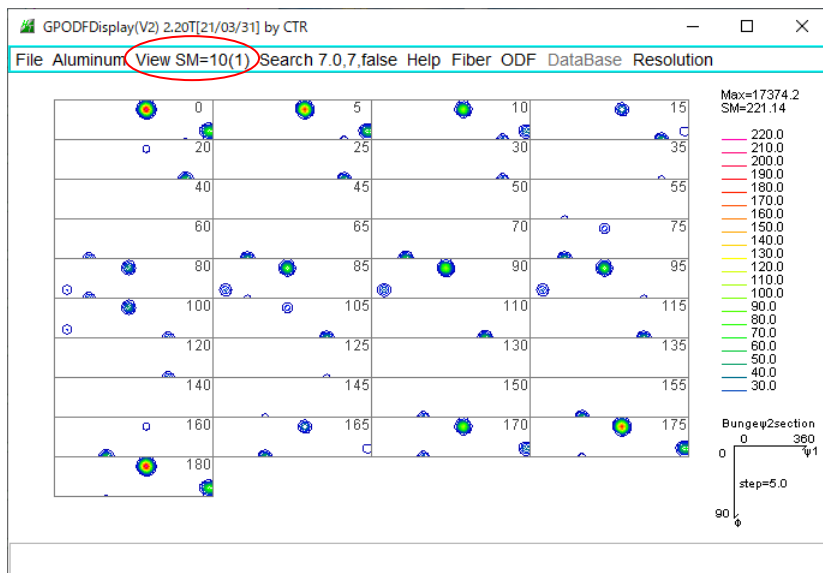
MTEX



L a b o T e x (T-Cubic)



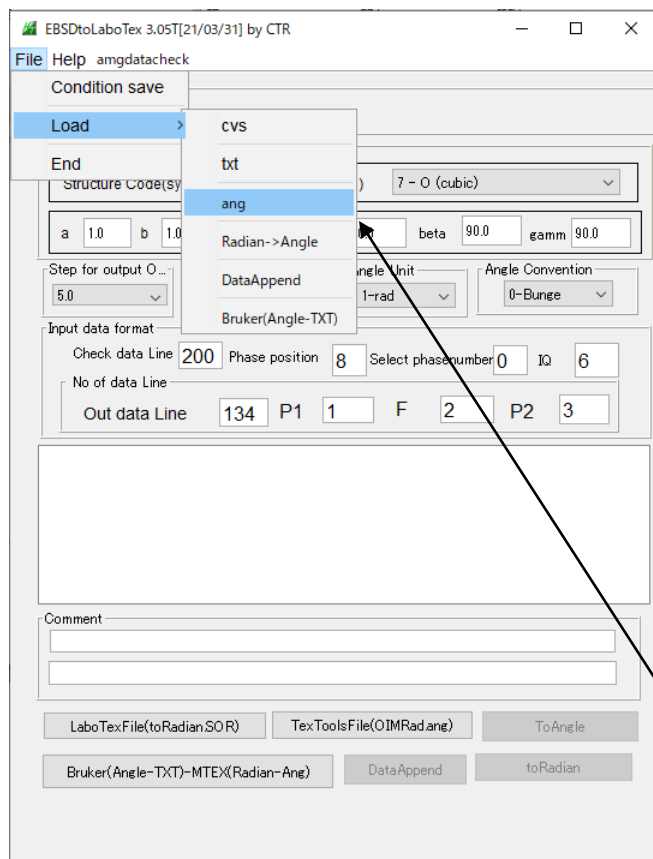
L a b o T e x ODF 図の平滑化



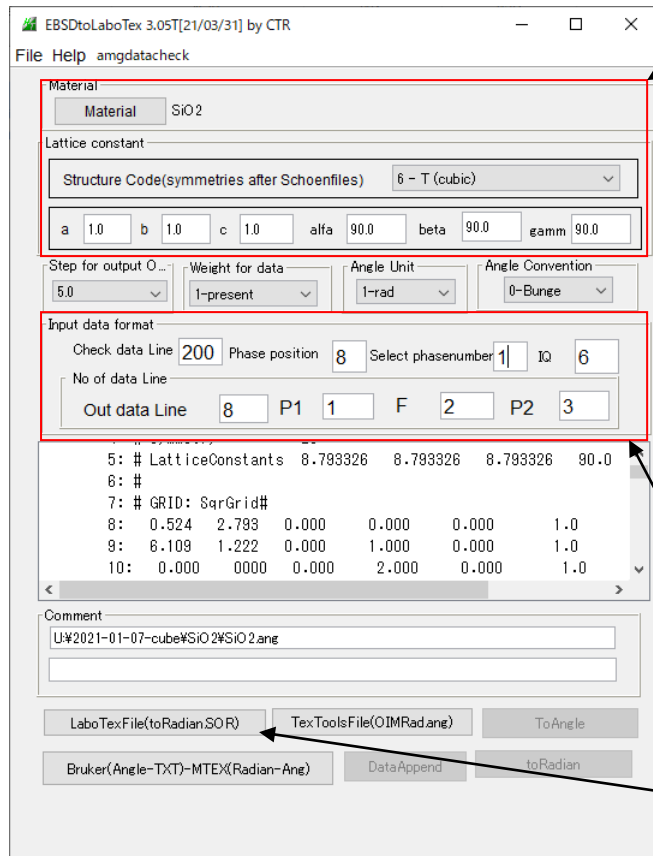
MTEXODF 図は方位の広がりが大きいため、L a b o T e x データを平滑化して方位を広げて比較

LaboTex向けSORファイル

AngデータからSORファイルを作成



Angデータを選択



パラメータを入力してSORを作成

Angデータ選択で物質名、LaboTexStructureCode, 格子定数は

SiO₂のAngデータ

物質名 → 格子定数

```
# Phase 1↓
# MaterialName SiO2↓
# Formula
# Symmetry 23↓
# LatticeConstants 8.793326 8.793326 8.793326 90.0 90.0 90.0↓
#
# GRID: SqrGrid#↓
0.524 2.793 0.000 0.000 0.000 1.0 1.0 1 1↓
6.109 1.222 0.000 1.000 0.000 1.0 1.0 1 1↓
0.000 0000 0.000 2.000 0.000 1.0 1.0 0 1↓
0.000 0000 0.000 3.000 0.000 1.0 1.0 0 1↓
0.000 0000 0.000 4.000 0.000 1.0 1.0 0 1↓
```

LaboTexStructureCode変換

C: ¥CTR¥Data¥EBSDtoLaboTex¥SpaseG. TXTから変更

Symmetry=23

LaboTexStructureCode

191	P6/mmm	62	11↓
192	P6/mcc	62	11↓
193	P63/mcm	62	11↓
194	P63/mmc	62	11↓
195	P23	23	6↓
196	F23	23	6↓
197	I23	23	6↓
197	P213	23	6↓
199	I213	23	6↓
200	Pm3	23	6↓
201	Pn3	23	6↓
202	Fm3	23	6↓
203	Fd3	43	7↓
204	Im3	43	7↓
205	Pa3	43	7↓
206	Ia3	43	7↓
207	P432	43	7↓

LaboTexStructureCodeはEBSDAngdataMaker検証により追加修正を行っています。

使用したソフトウェア

MATLAB R2007b

MTEX-5.4.0

LaboTex 3.0.50

EBSDAngdataMaker 1.00

EBSDtoLaboTex 3.05

GPODFDisplay 2.20

MTEX動作環境

MTEXODF解析

LaboTexODF解析

Angデータ作成 (MTEX入力データ作成)

LaboTex-SORファイル作成

MTEXとLaboTex比較