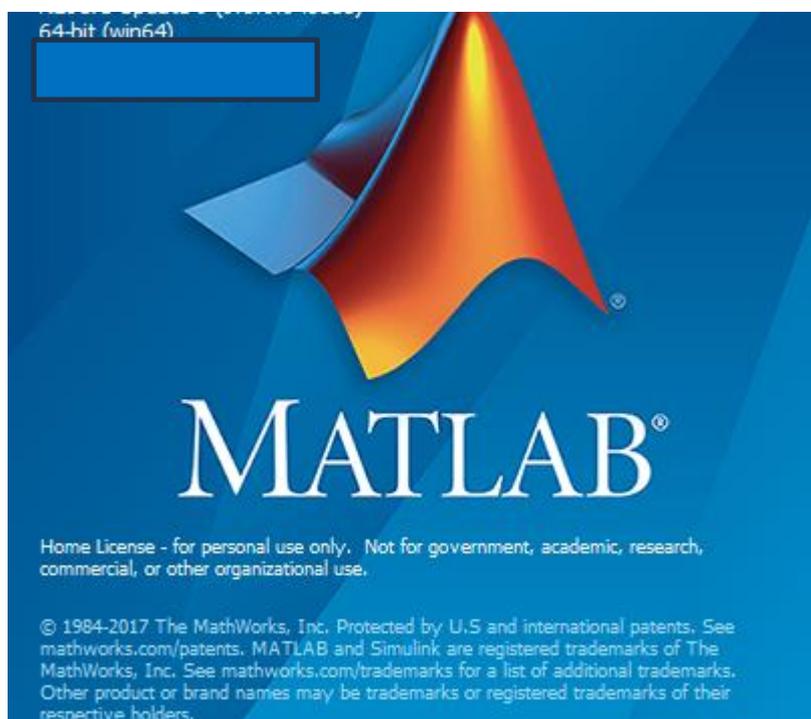


MATLAB環境下で使えるFreeODFソフトウェアMTEx



2024年12月22日

HelpTex Office

1. 概要
2. MATLABにMTEXの読み込み
3. XRDデータの読み込み
 3. 1 XRDデータの変換
 3. 2 a s cデータに対する各種補正
 3. 3 T X T 2データからMTEXが読み込むa s cデータに変換
 3. 4 MTEXでホルダの選択
 3. 5 a s cデータの読み込み
4. EBSDデータ読み込み
 4. 1 EBSDデータの変換
 4. 2 H K L - c t fフォーマットでMTEX入力データ作成
 4. 3 H K L - c t fデータをMTEXに読み込み
 4. 4 ODF解析
5. MTEXのODF解析パラメータ
6. ODF図のE x p o r t
7. 極点図のE x p o r t
 7. 1 E x p o r tデータをT X T 2に変換し表示
8. 逆極点図のE x p o r t
 8. 1 逆極点E x p o r t用mファイルを読み込む
 8. 2 E x p o r t
9. 方位のシュミレーション
 9. 1 ODFシュミレーション
 9. 2 極点図シュミレーション
 9. 3 逆極点図シュミレーション
10. c i fデータのd o w n l o a d

1. 概要

E B S D, X R D測定データに対応している O D Fソフトウェアとして市販されている L a b o T e x や T e x T o o l s が知られているが、M A T L A Bが使える企業や大学では、無料で使える M T E Xの使用も考えられる。2024/12/21現在download可能なMTEXは以下があります。

2017のMATLABで動作する最新版は、m t e x - 5 . 8 . 2 であるが、導入時の m t e x - 5 . 1 . 1, m t e x - 5 - 8 . 0 も併用している。

m t e x - 5 . 8 . 2 以降の組み合わせではM A T L A Bのサポートなしのエラーが発生する。

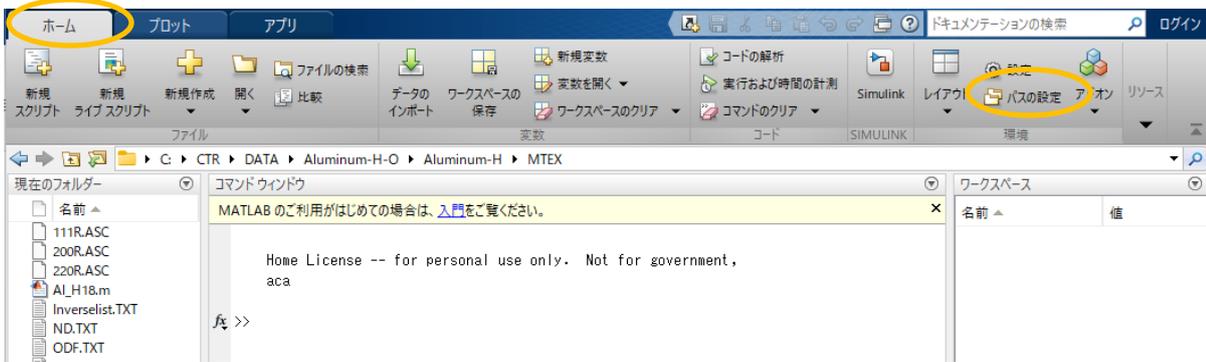
ファイル名	発売日	コメント	ダウンロード
mtex-6.0.0.zip ↓	2024年11月	3D グレイン	1.3k
mtex-5.11.2.zip ↓	2024年4月	より良い穀物の再構築	5.4k
mtex-5.11.1.zip ↓	2024年3月	より良い穀物の再構築	1.3k
mtex-6.0.beta3.zip ↓	2024年3月	擬似3D EBSD	1.3k
mtex-6.0.beta2.zip ↓	2023年9月	擬似3D EBSD	3k
mtex-5.10.2.zip ↓	2023年9月	バグ修正	3.1k
mtex-5.10.0.zip ↓	2023年5月	重み付きパーカーベクトル	3.4k
mtex-5.9.0.zip ↓	2023年3月	習慣面検出、SO3Fun	3.7k
mtex-5.8.2.zip ↓	2022年11月	バグ修正	3.5k
mtex-5.8.1.zip ↓	2022年3月	バグ修正	7.4k
mtex-5.8.0.zip ↓	2022年1月	バリエーショングラフに基づく親粒子の再構築	2006
mtex-5.7.0.zip ↓	2021年5月	改良された親粒子の再構築	7086

M A T L A Bは古いですが以下、m t e x - 5 . 8 . 2 との組み合わせを説明します。

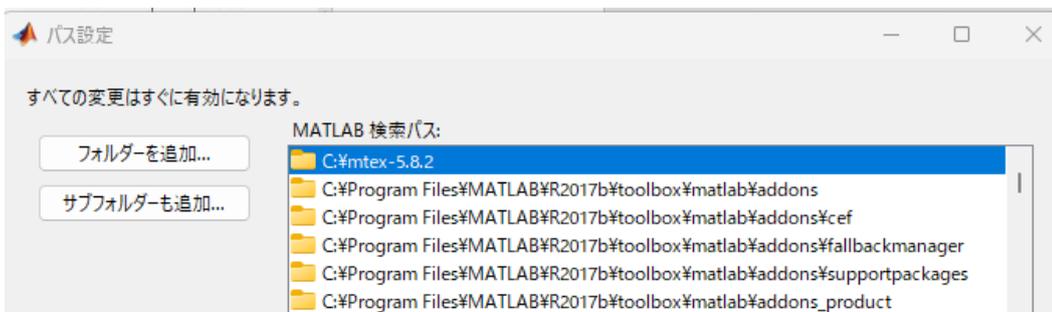
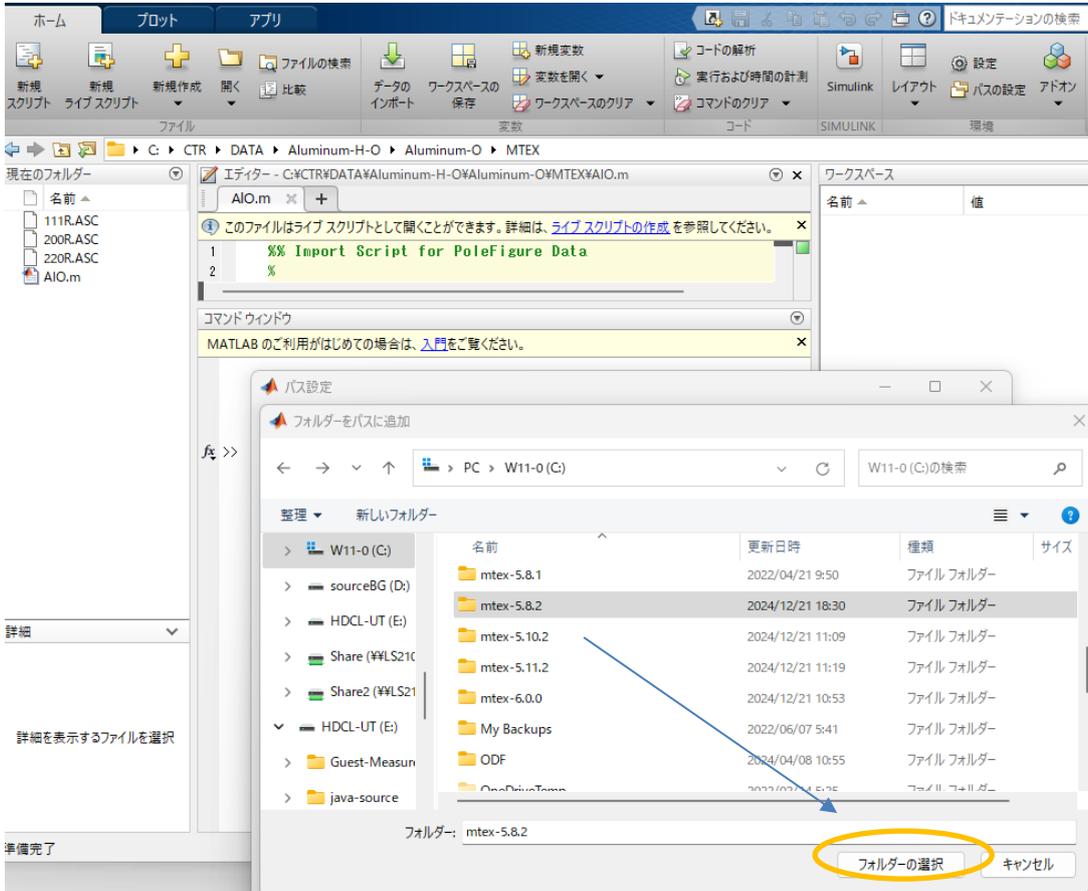
M T E Xでは、E B S D, X R D測定データの解析とシュミレーション機能があります。

以下でこれらの解説を行います。

2. MATLABにMTEXの読み込み



ホームタブ、パスの設定でm t e x 5. 1 1. 2を選択



保存して閉じ、再起動で

```
initialize MTEX 5.8.2 .... done!

MTEX 5.8.2 (show documentation)
  Import pole figure data
  Import EBSD data
  Import ODF data

  Uninstall MTEX
```

読み込まれています。

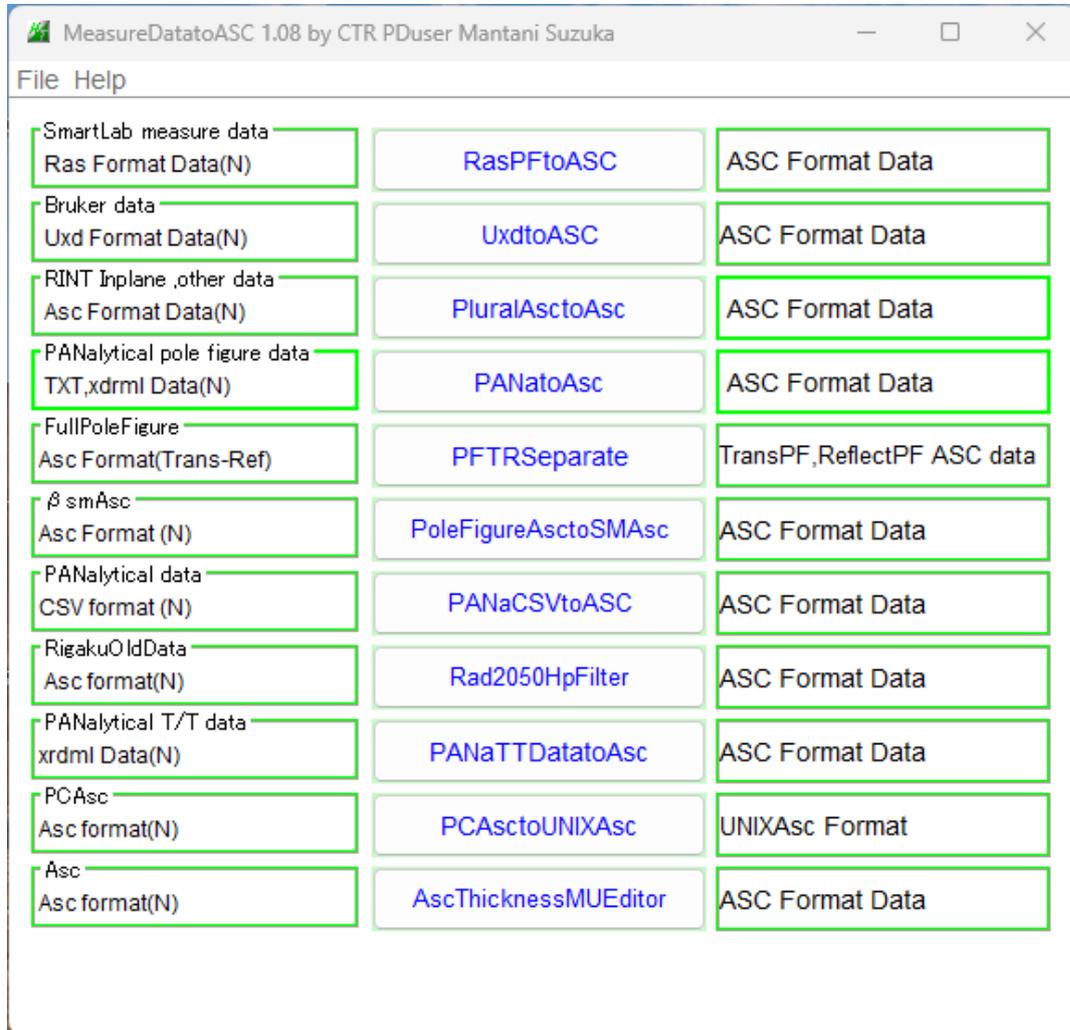
3. XRDデータの読み込み

XRDデータはバックグラウンド除去、吸収補正、`defocus`補正など各種補正後のデータを
読み込む

`interface`として各種フォーマットが用意されているが、本資料では、補正後のデータ
フォーマットとして`asc`データとします。

各メーカーの測定データフォーマットは、CTRソフトウェアで変換処理を行って読み込ませます。

3. 1 XRDデータの変換



各メーカー測定データは、上記ソフトウェアで`asc`フォーマットに変換される

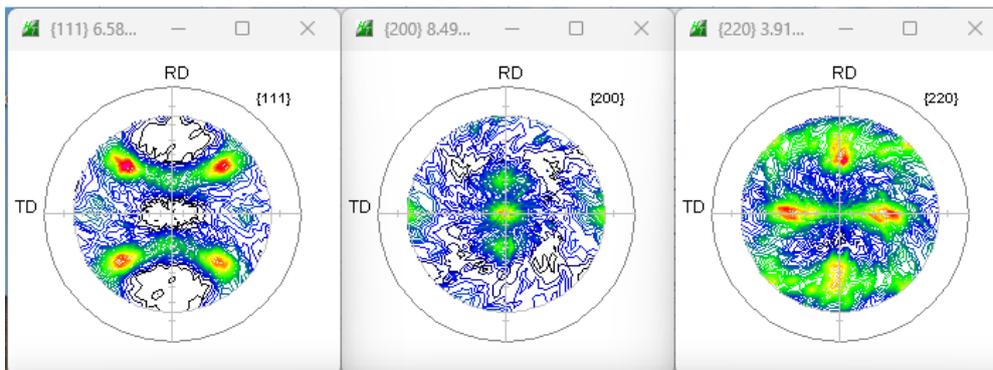
3. 2 `asc`データに対する各種補正

CTRソフトウェアの

ODFPoleFigure.jar	2022/01/31 4:46	Executable Jar File	132 KB
ODFPoleFigure1_5.jar	2024/02/18 7:31	Executable Jar File	215 KB
ODFPoleFigure1_5S.jar	2024/02/18 7:05	Executable Jar File	225 KB
ODFPoleFigure2.jar	2024/02/18 7:32	Executable Jar File	280 KB
ODFPoleFigure2S.jar	2024/02/18 7:32	Executable Jar File	289 KB

で処理結果をTXT2 (α 、 β 、強度)に変換する。

3. 3 T X T 2 データから M T E X が読み込む a s c データに変換

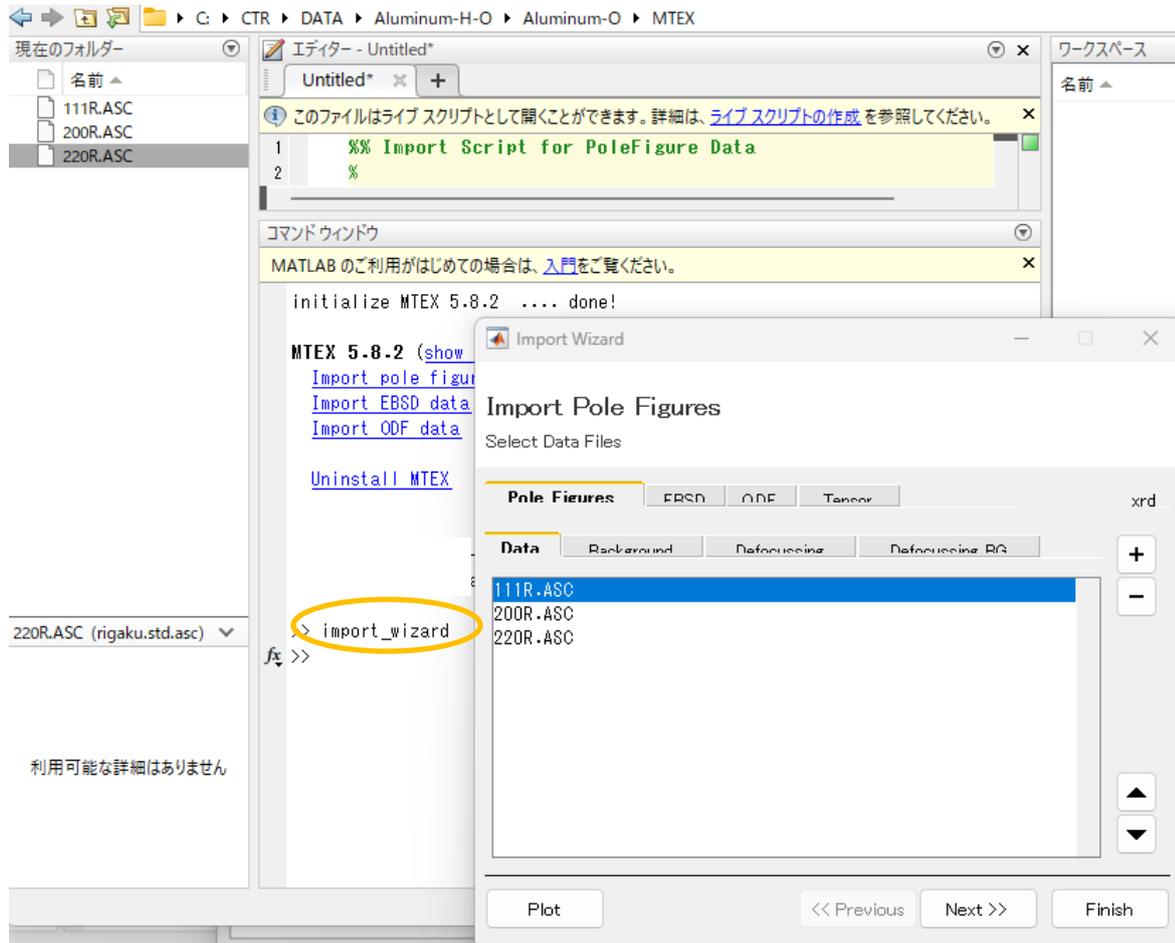


h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
2,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
2,2,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

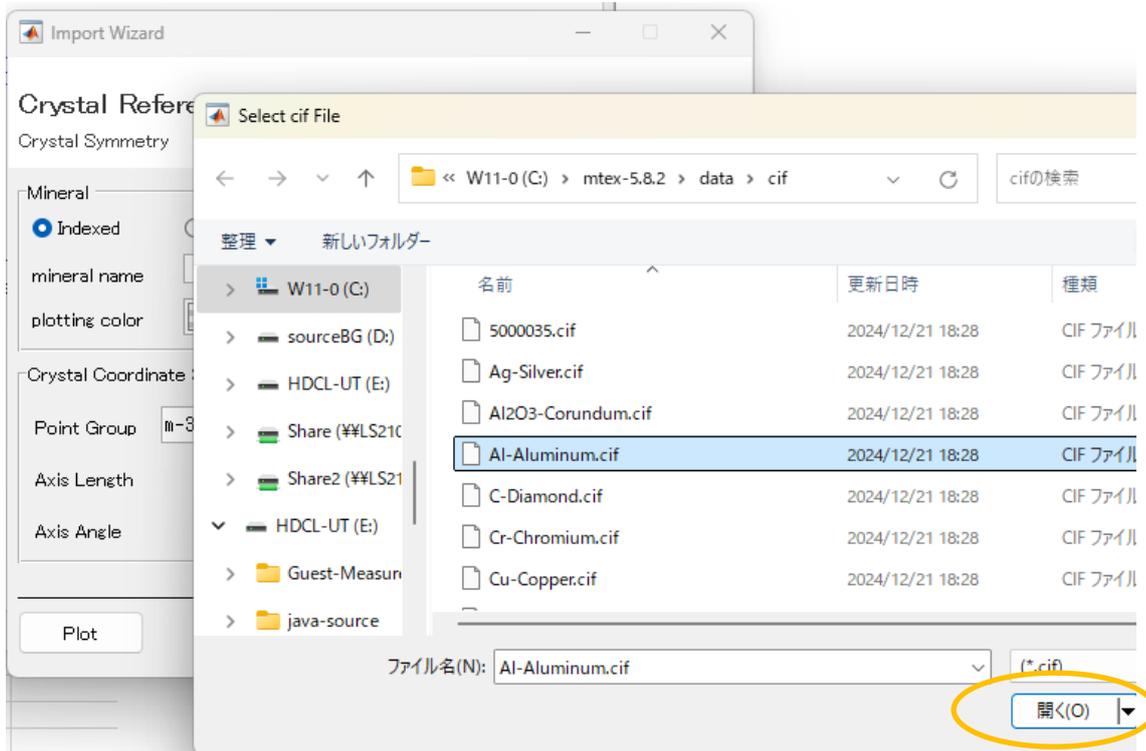
極点データ処理結果の T X T 2 データを M T E X で読み込む a s c データに変換する。

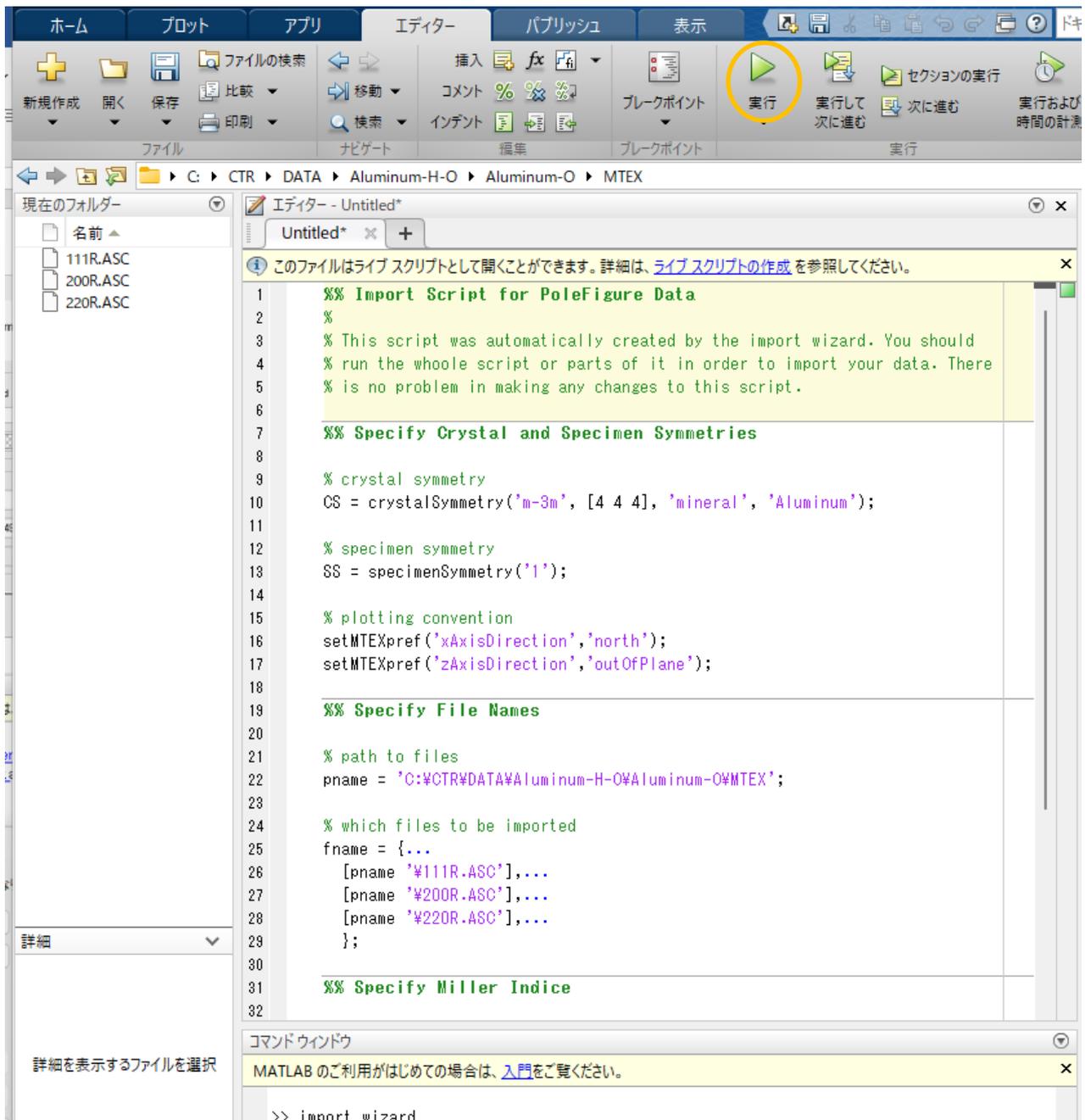
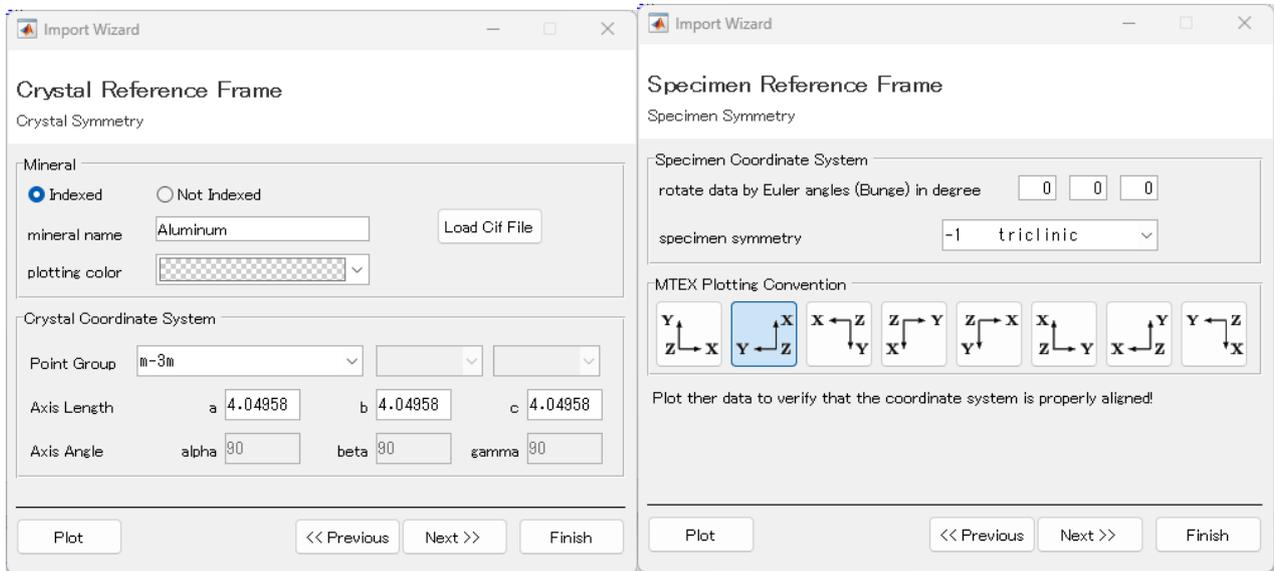
3. 4 M T E X でホルダの選択

3. 5 a s cデータの読み込み

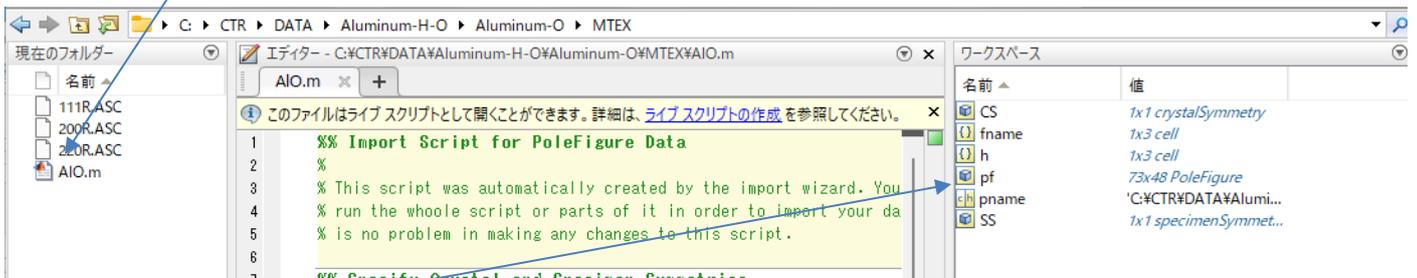
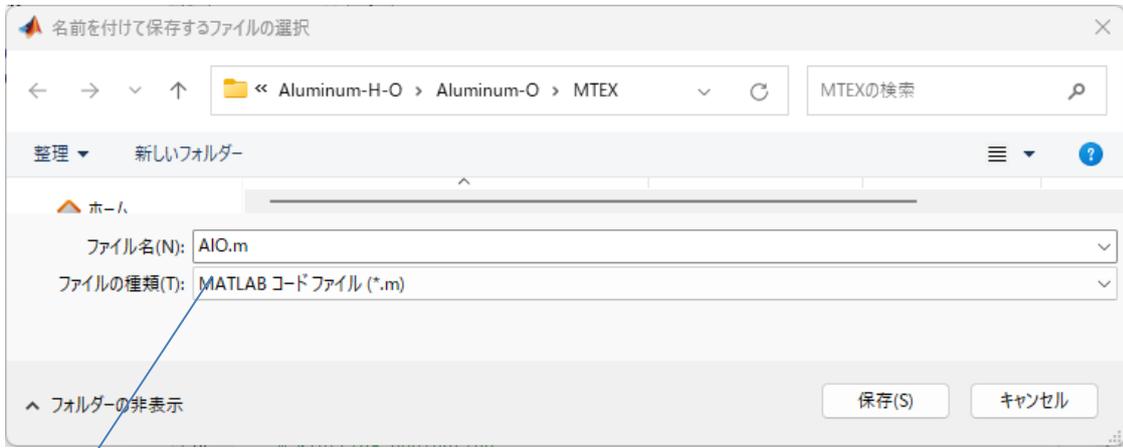


c i f の選択



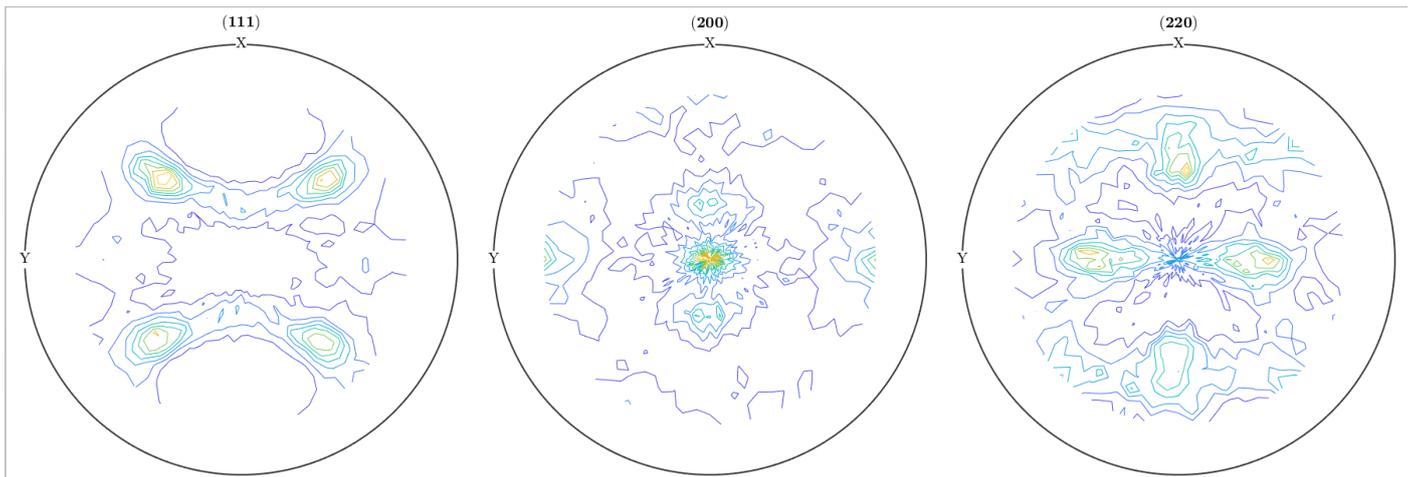


実行でコードファイルが作成される



p f が読み込まれた極点図

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



データが読み込まれています。

4. EBSDデータ読み込み

EBSDデータも各種 `interface` が存在する、本資料では全てのEBSDデータをCTRソフトウェアのEBSD to ODFソフトウェアで `HKL-ctf` に変換を行い `MTEX` に読み込ませる。

例えば、`mtx5.1.1` 付属データ `titanium.txt`

ファイル	編集	表示									
phi1	Phi	phi2	phase	ci	iq	sem_signal	x	y	grainId		
227	3.99925	343.998	0	0.391	3169.6	1	0	0	1		
298.932	155.674	301.718	0	0.7	3173.6	17605	12	0	7		
298.03	155.571	301.047	0	0.614	3147.5	17328	24	0	7		
298.509	155.642	301.608	0	0.823	3305.9	17295	36	0	7		
298.956	155.845	302.095	0	0.527	2912.5	19095	48	0	7		
298.354	155.753	301.087	0	0.632	2976.8	17766	60	0	7		
298.702	155.547	301.802	0	0.791	3143.4	18189	72	0	7		
298.793	155.811	301.425	0	0.882	3411.8	18203	84	0	7		

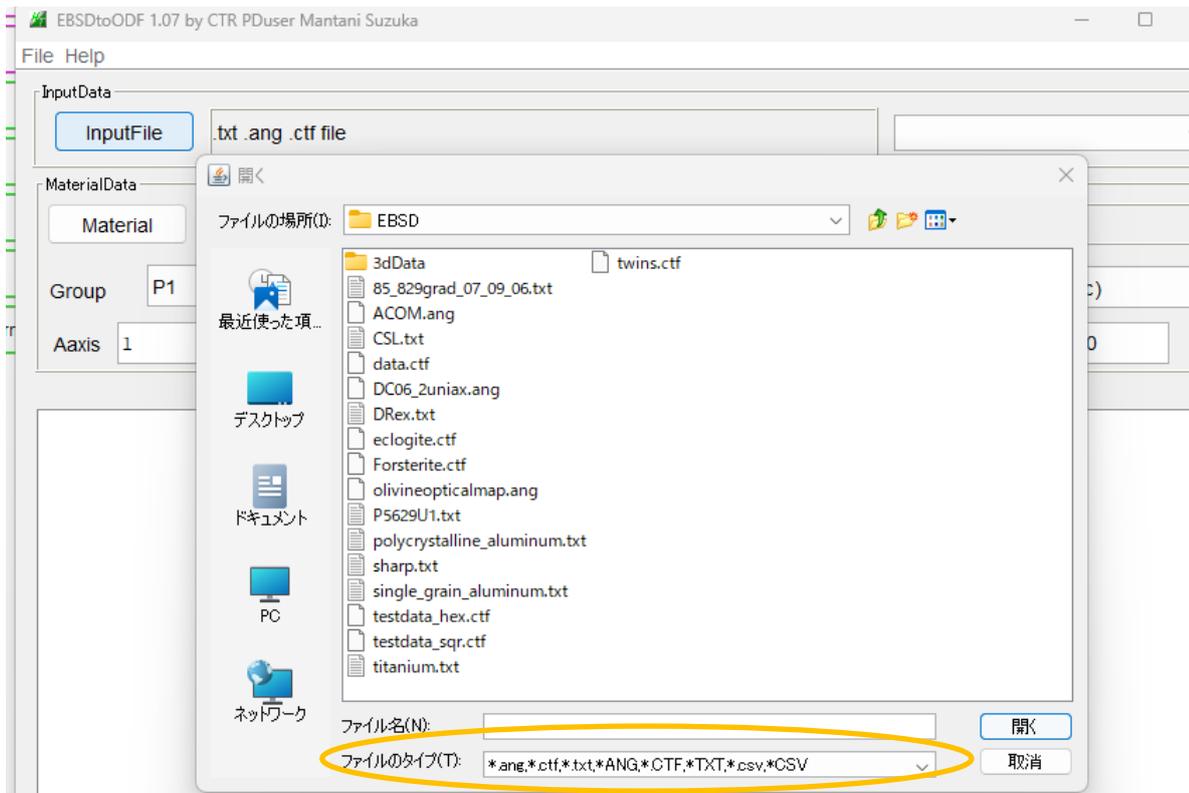
を `MTEX` に読み込ませると

The screenshot shows the MATLAB environment with the 'EBSD Generic Interface' wizard open. The wizard is titled 'EBSD Generic Interface' and 'Select Data Format'. It displays a table of data extracted from a file, with columns for phi1, Phi, phi2, phase, and ci. The data rows correspond to the table shown above. The wizard also shows a list of files in the current folder and a command window with MATLAB code for importing the data.

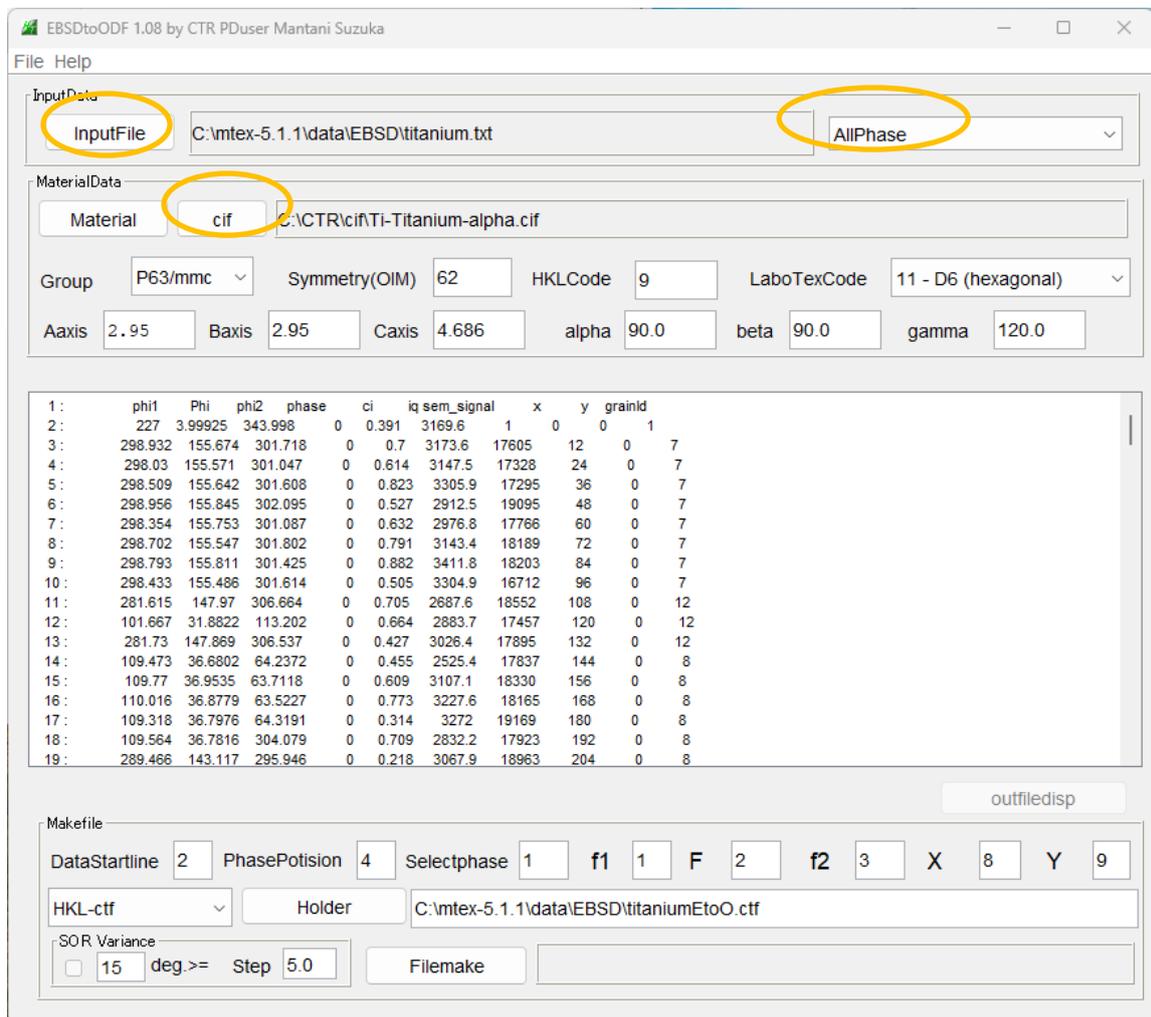
	phi1	Phi	phi2	phase	ci
1	227	3.9993	343.9980	0	
2	298.9320	155.6740	301.7180	0	
3	298.0300	155.5710	301.0470	0	
4	298.5090	155.6420	301.6080	0	
5	298.9560	155.8450	302.0950	0	
6	298.3540	155.7530	301.0870	0	
7	298.7020	155.5470	301.8020	0	
8	298.7930	155.8110	301.4250	0	
9	298.4330	155.4860	301.6140	0	
10	281.6150	147.9700	306.6640	0	
11	101.6670	31.8822	113.2020	0	
12	281.7300	147.8690	306.5370	0	
13	109.4730	36.6802	64.2372	0	
14	109.7700	36.9535	63.7118	0	
15	110.0160	36.8779	63.5227	0	
16	109.3180	36.7976	64.3191	0	

となり受け付けられない。このような場合EBSD to ODFソフトウェアで対応します。

4. 1 EBSD to ODFソフトウェアによるデータ変換

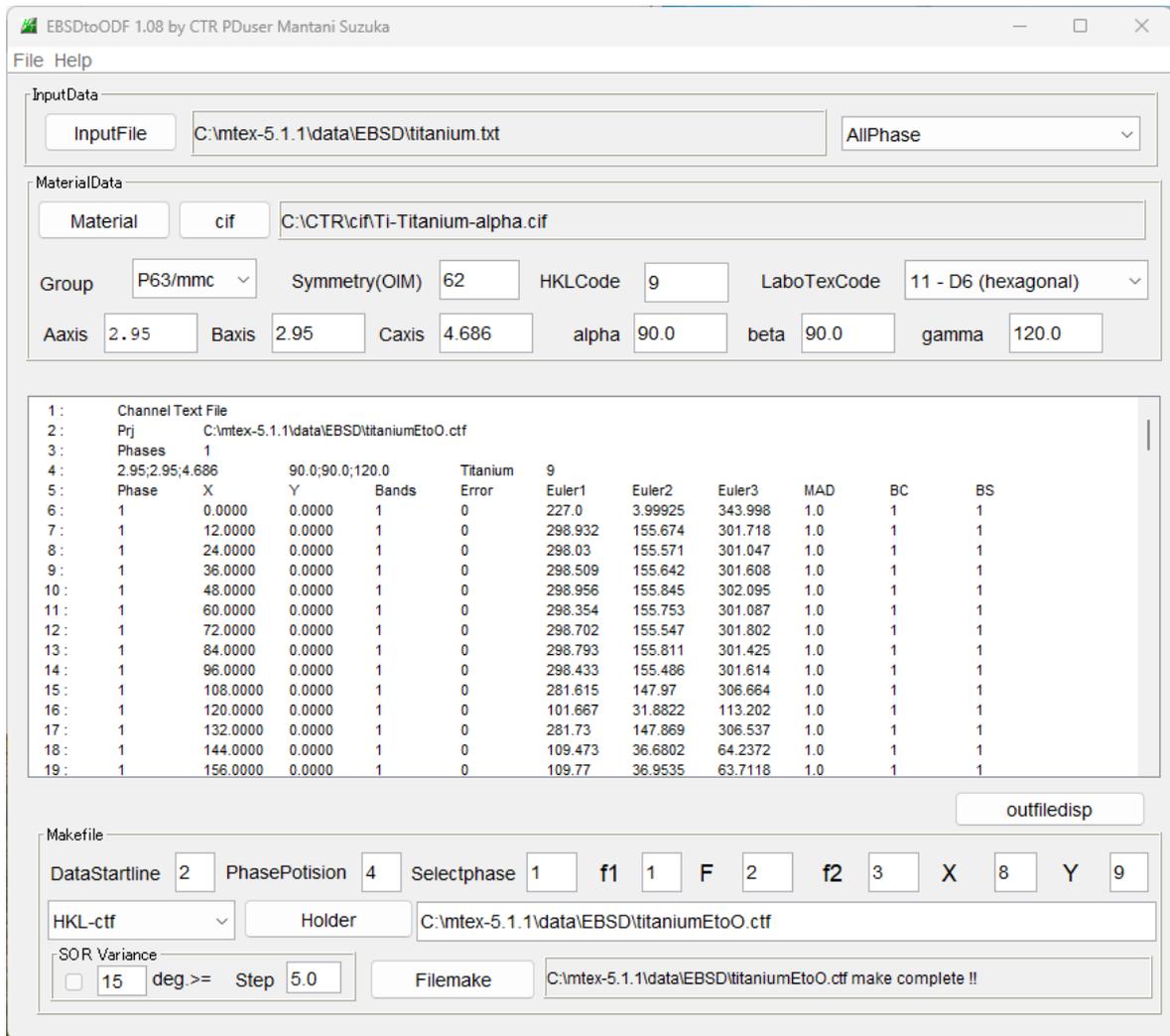


各種フォーマットに対応しています。

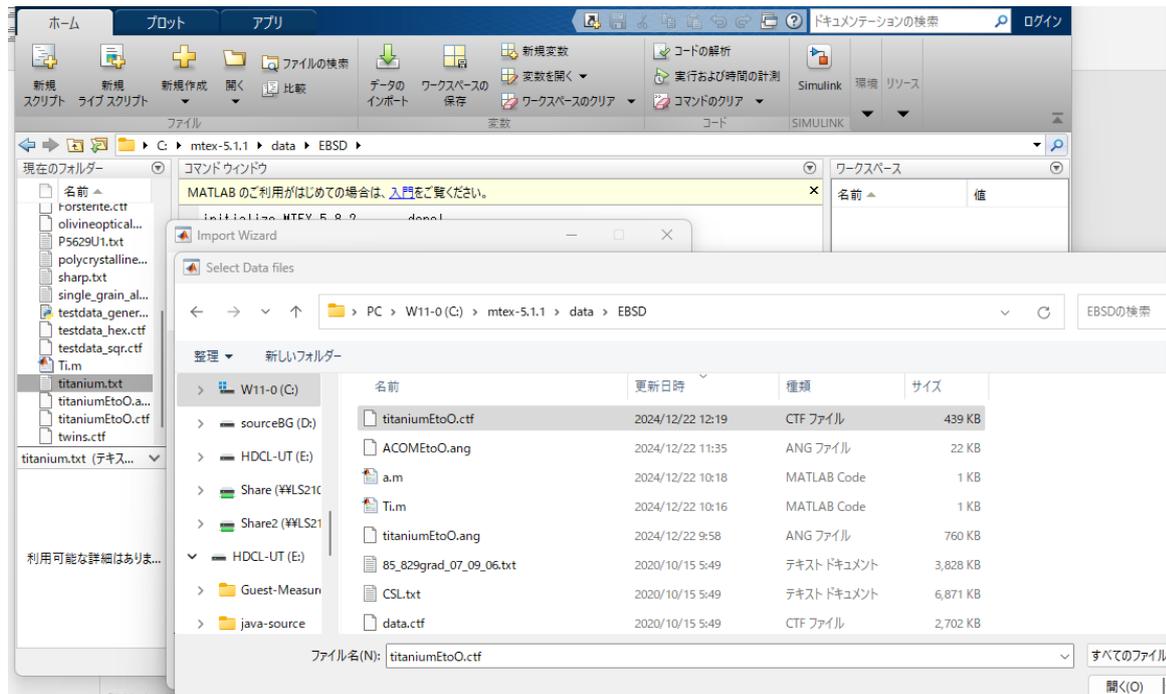


入力データと cif (Material) を指定、phase を AllPhase

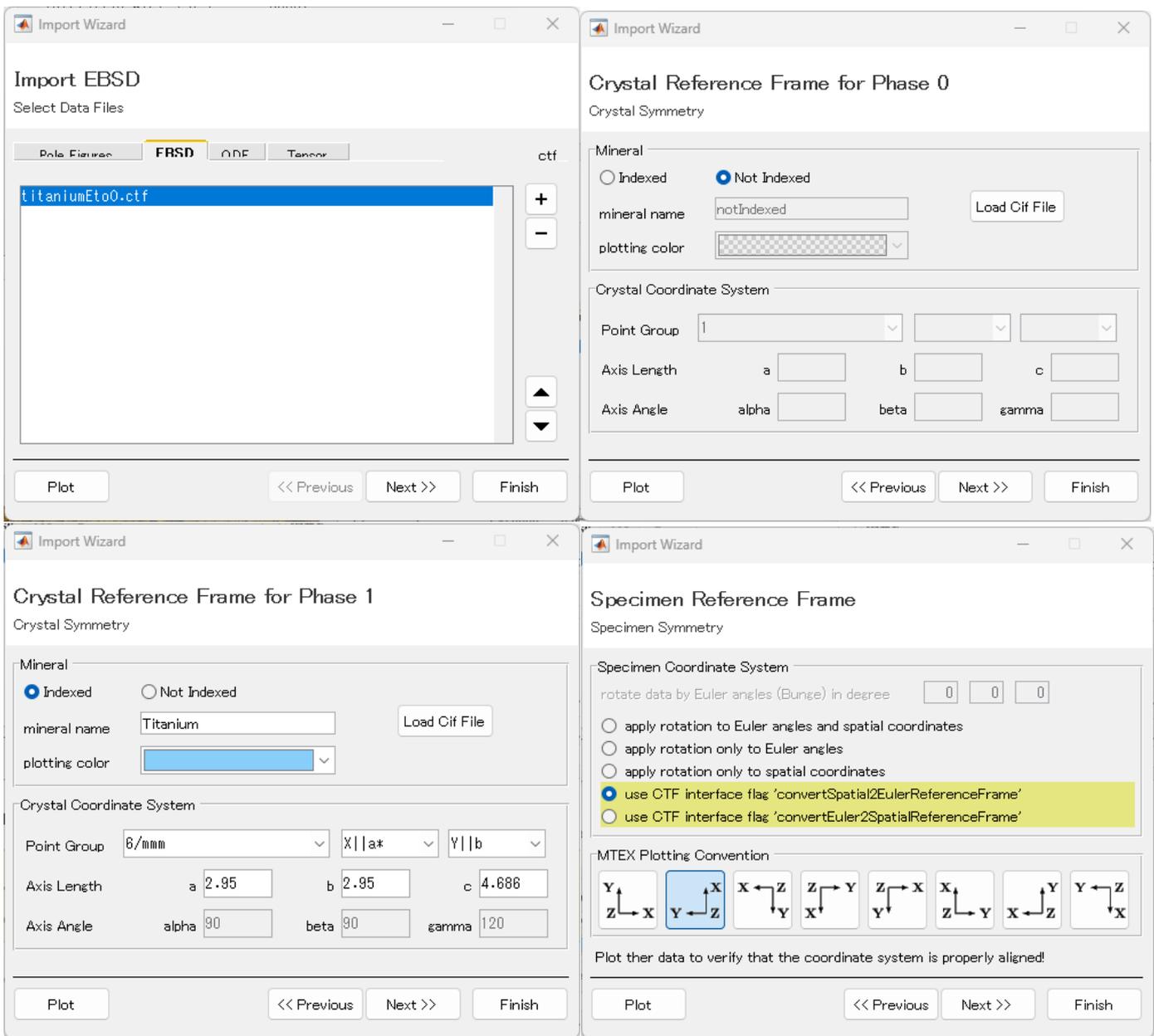
4. 2 HKL-ctfフォーマットでMTEX入力データ作成



4. 3 HKL-ctfデータをMTEXに読み込み



読み込めます。



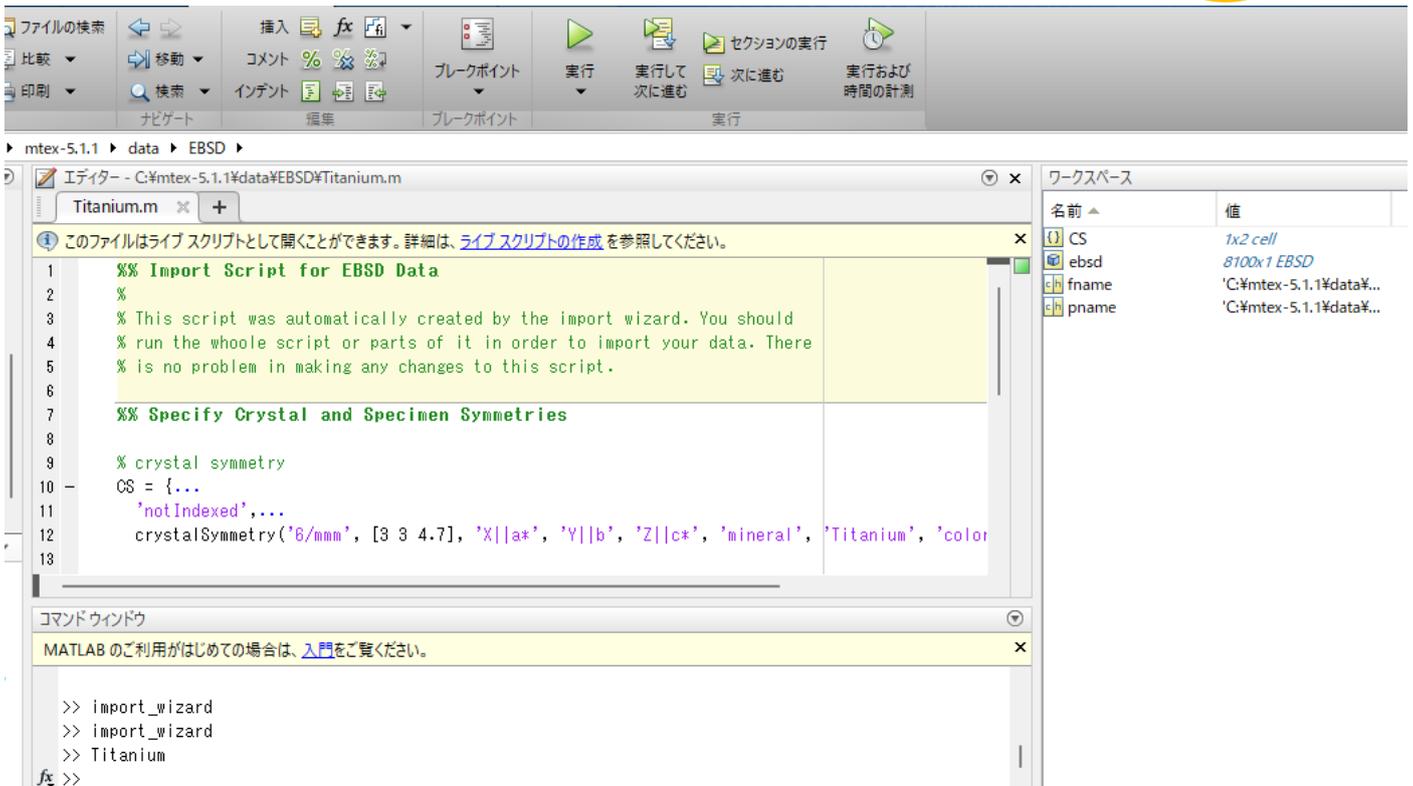
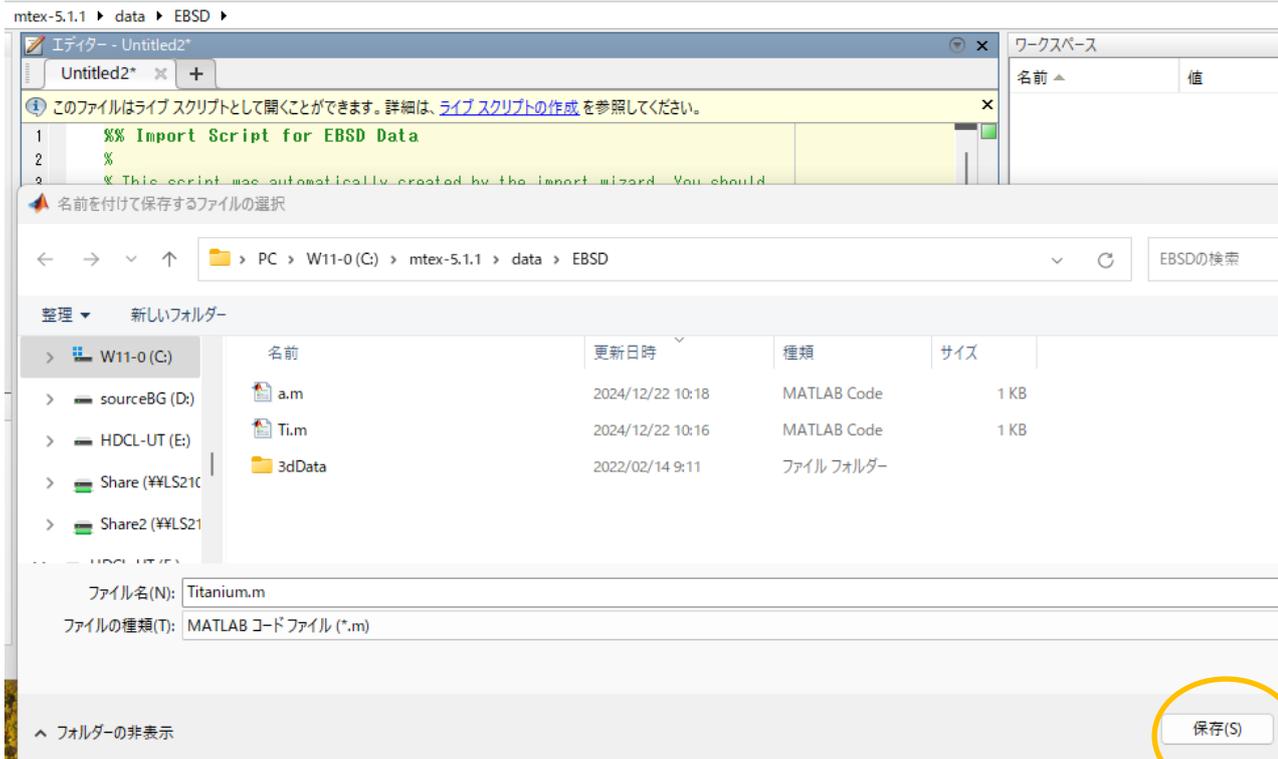
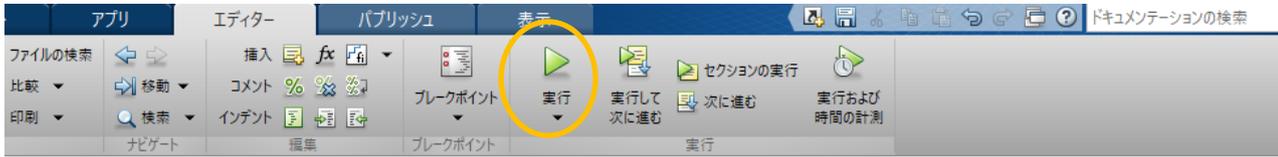
読み込めています。

このファイルはライブスクリプトとして開くことができます。詳細は、[ライブスクリプトの作成](#)を参照してください。

```

4 % run the whole script or parts of it in order to import your data. There
5 % is no problem in making any changes to this script.
6
7 %% Specify Crystal and Specimen Symmetries
8
9 % crystal symmetry
10 CS = {...
11     'notIndexed',...
12     crystalSymmetry('6/mmm', [3 3 4.7], 'X||a*', 'Y||b', 'Z||c*', 'mineral', 'Titanium', 'color', [0.53 0.81 0.98])};
13
14 % plotting convention
15 setMTEXpref('xAxisDirection','north');
16 setMTEXpref('zAxisDirection','outOfPlane');
17

```



e b s d データとして `'mineral', 'Titanium', 'i` Titanium が読み込まれています。

4. 4 ODF解析

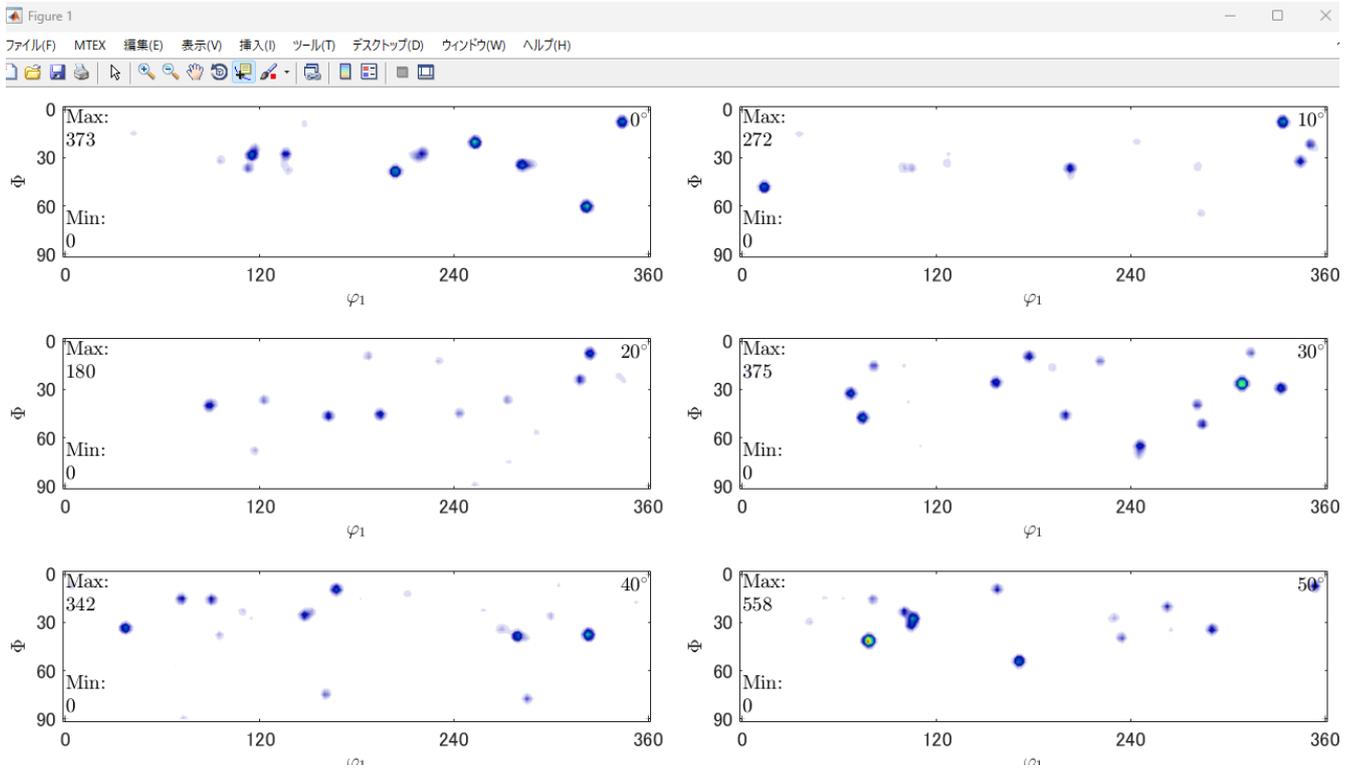
```
>> plot(ebsd)
>> odf = calcDensity(ebsd('Titanium').orientations,'halfwidth',2*degree)
```

```
odf = ODF (Titanium → xyz)
```

Radially symmetric portion:

```
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 2°
center: 812 orientations, resolution: 1°
weight: 1
```

```
>> plot(odf)
```



5. MTEXのODF解析パラメータ

MTEXでは極の広がりを入力データに関係なく固定あるいは指定して描画されている。
指定しない場合、EBSDは25 degreeで描画される。

```
>> odf5 = calcDensity(ebsd('Titanium').orientations)
```

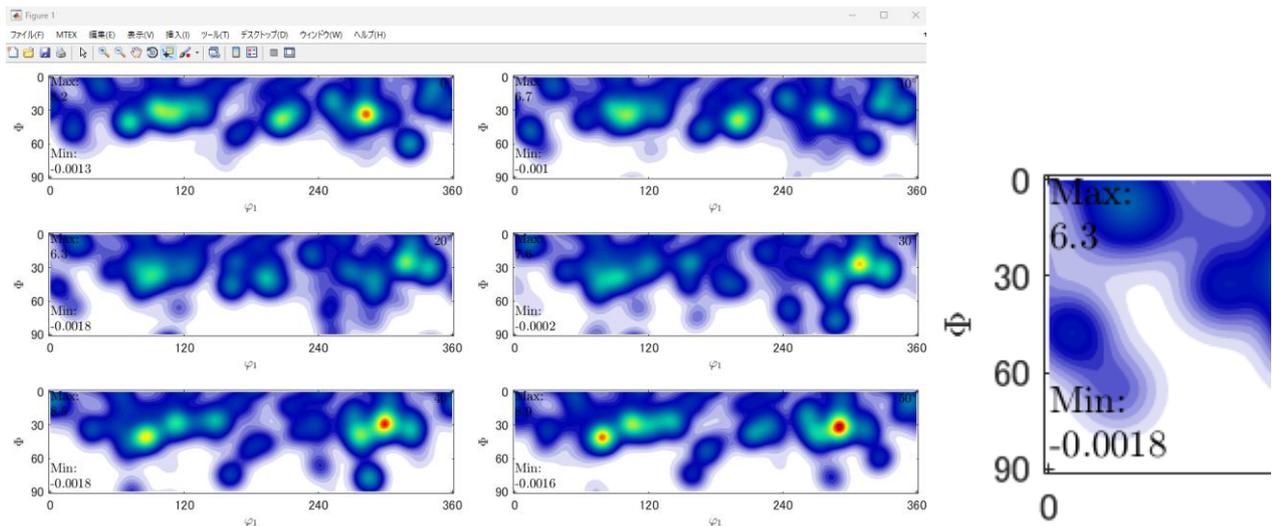
```
odf5 = ODF (Titanium → xyz)
```

```
Harmonic portion:
```

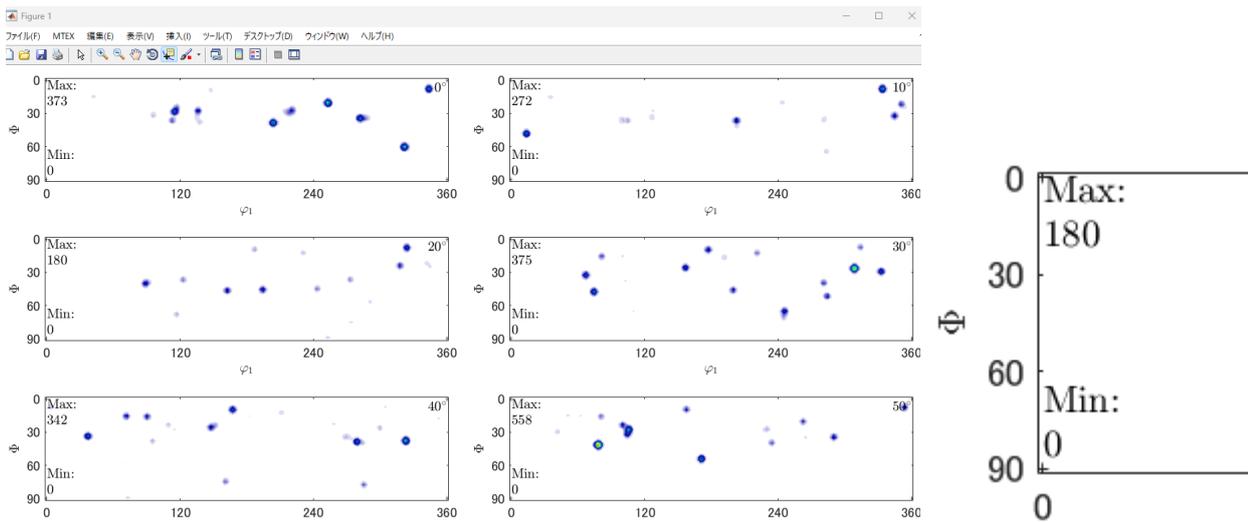
```
degree: 25
```

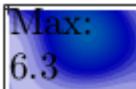
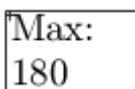
```
weight: 1
```

```
>> plot(odf5)
```



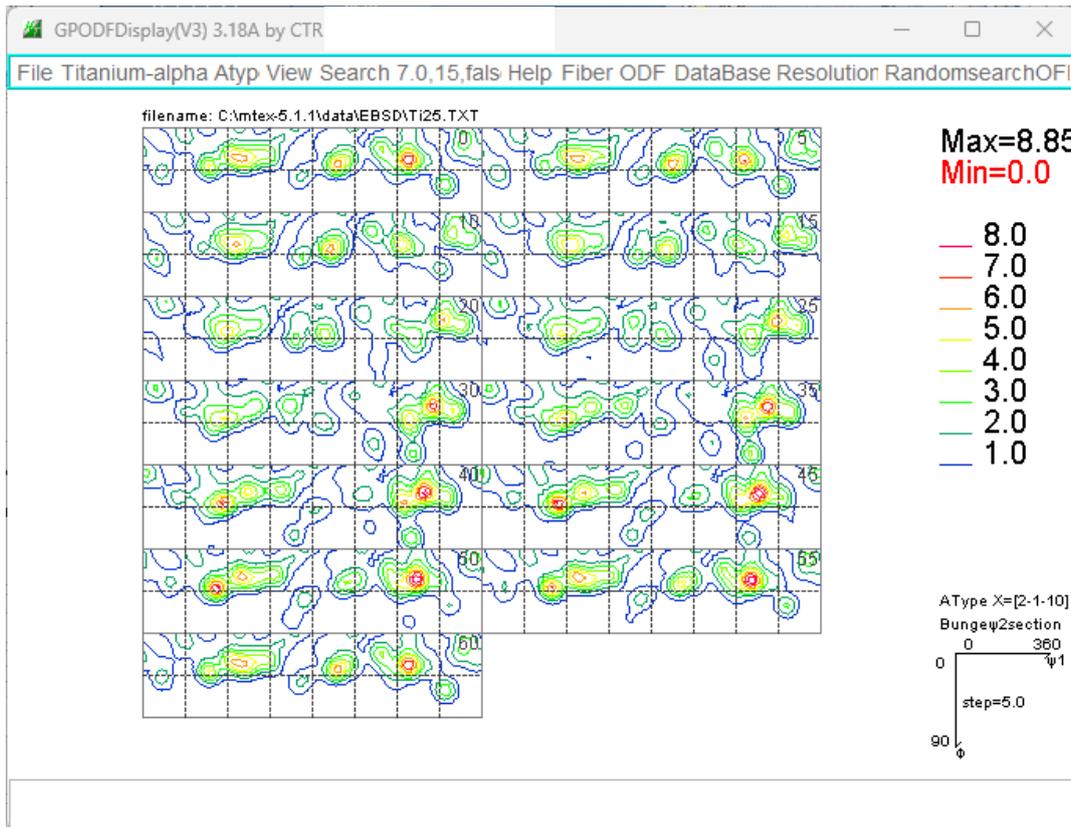
2 degree指定




 (25 degree) →
 
 (2 degree)

6. ODF図のExport

>> export(odf5, 'Ti25.TXT')



Tor ic l i n i c → O r t h o r h o m b i c



7. 極点図のExport

```
>> CSTi=ebsd('Titanium').CS
```

```
CSTi = crystalSymmetry
```

```
mineral      : Titanium  
color       : LightSkyBlue  
symmetry    : 6/mmm  
elements    : 24  
a, b, c     : 3, 3, 4.7  
reference frame: X||a*, Y||b, Z||c*
```

```
>> h={Miller(1,0,0,CSTi),Miller(0,0,2,CSTi),Miller(1,0,1,CSTi)}
```

```
h =
```

```
1×3 の cell 配列
```

```
{1×1 Miller} {1×1 Miller} {1×1 Miller}
```

```
>> rpf=calcPoleFigure(odf5,h)
```

```
rpf = PoleFigure
```

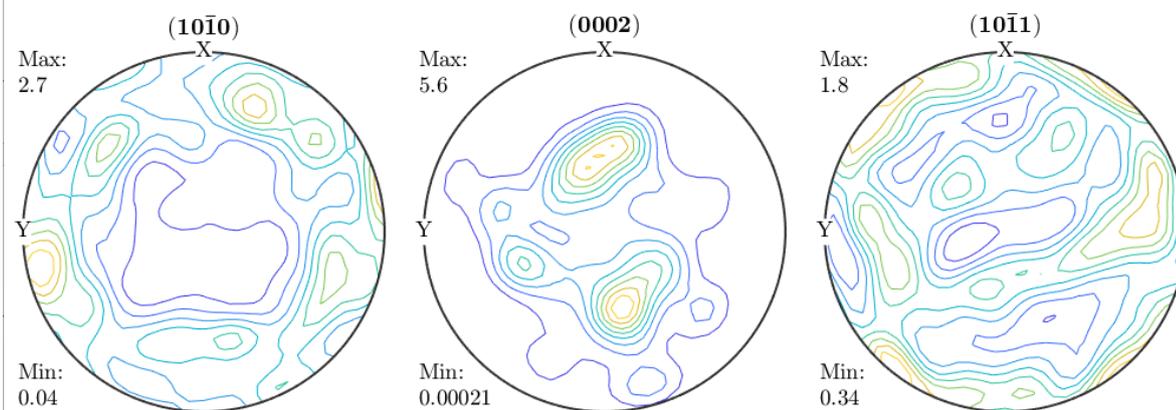
```
crystal symmetry : Titanium (6/mmm, X||a*, Y||b, Z||c*)  
specimen symmetry: 1
```

```
h = (10-10), r = 72 x 19 points
```

```
h = (0002), r = 72 x 19 points
```

```
h = (10-11), r = 72 x 19 points
```

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

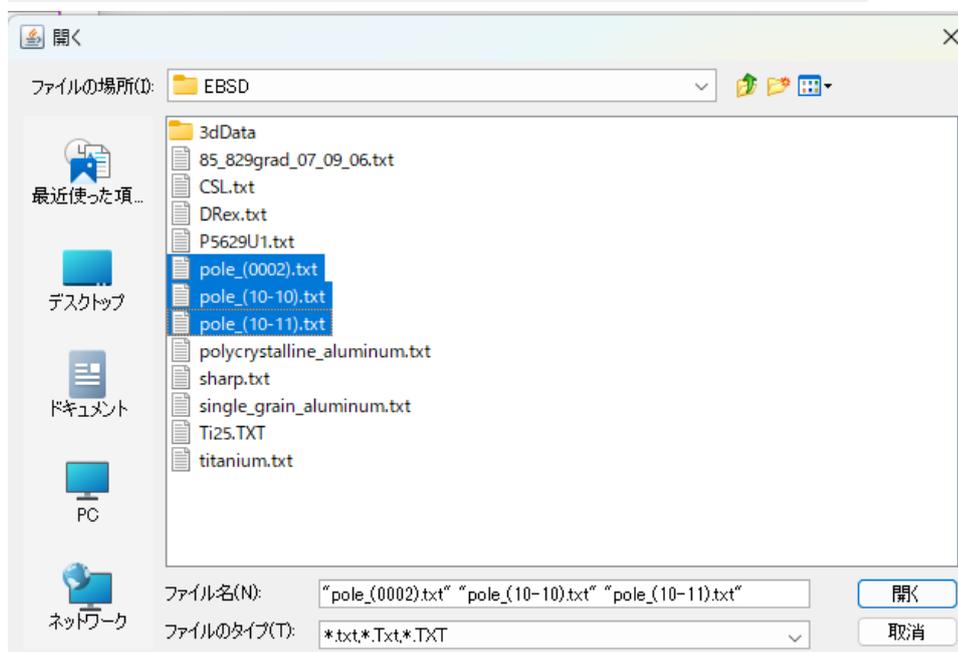
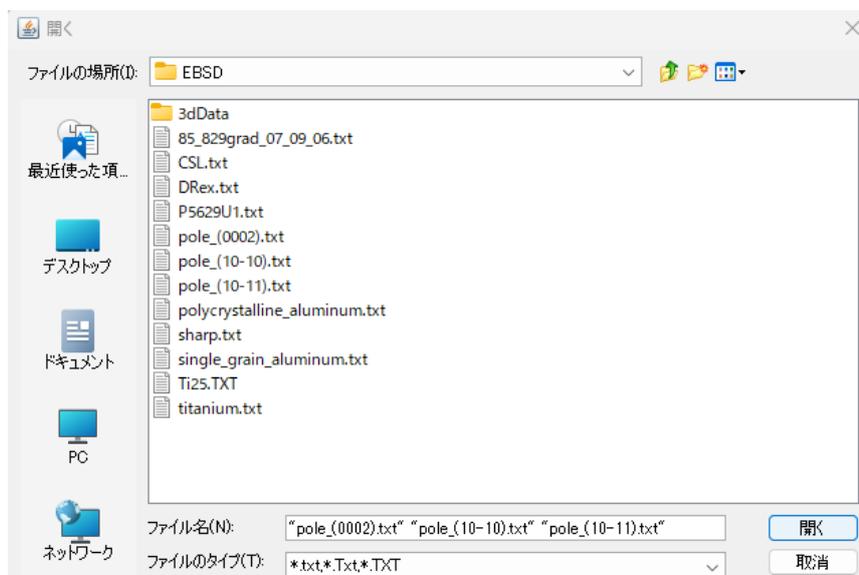
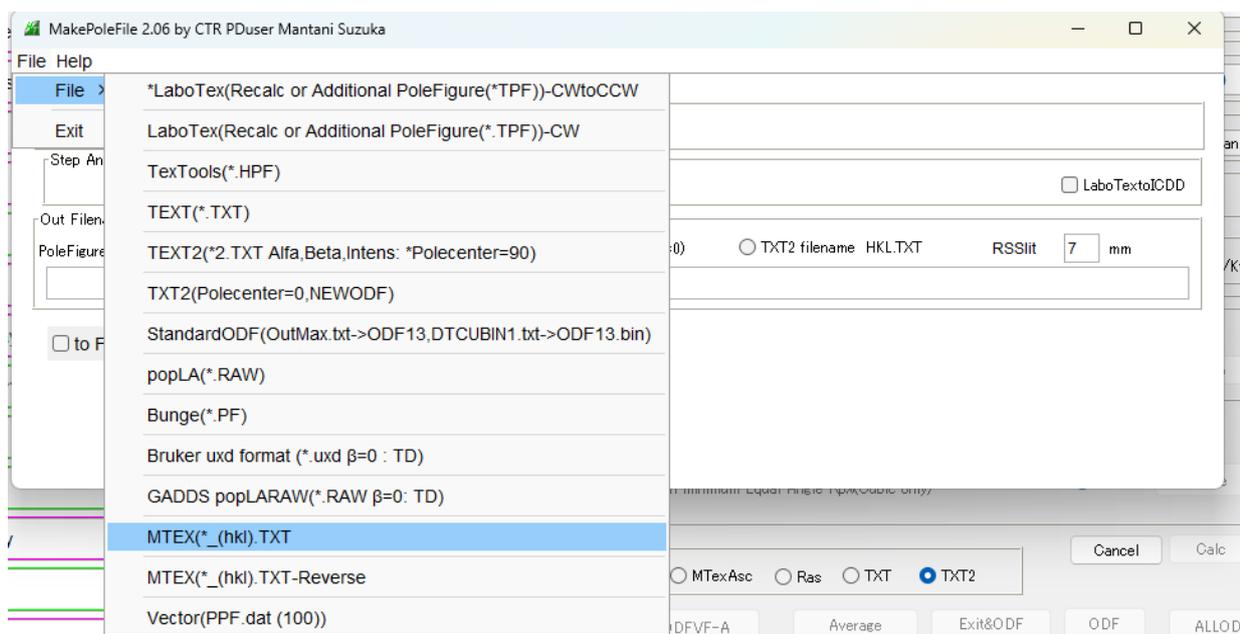


r p f の Export

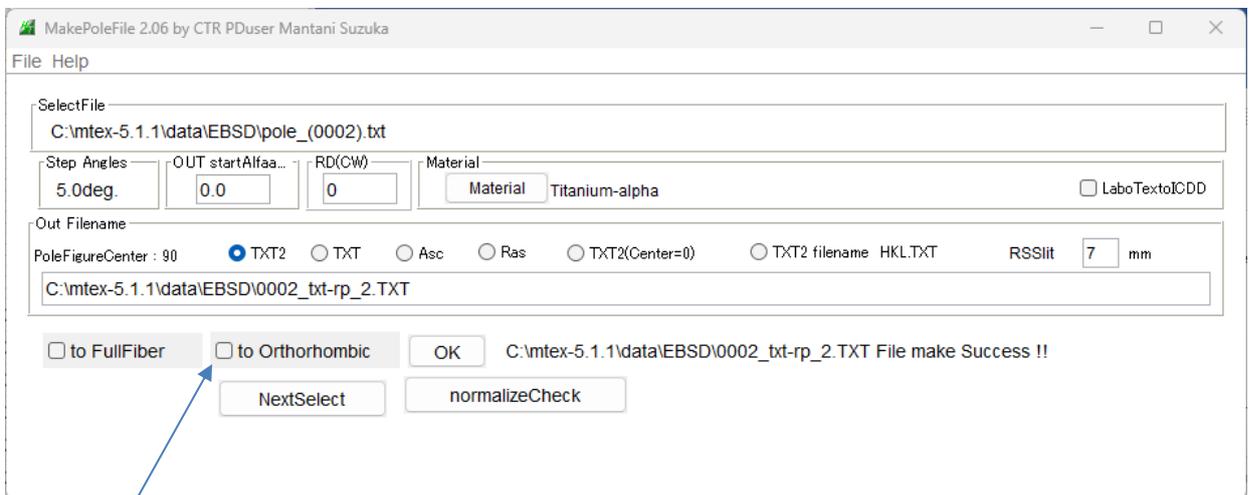
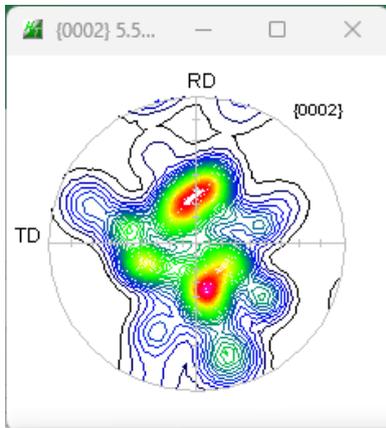
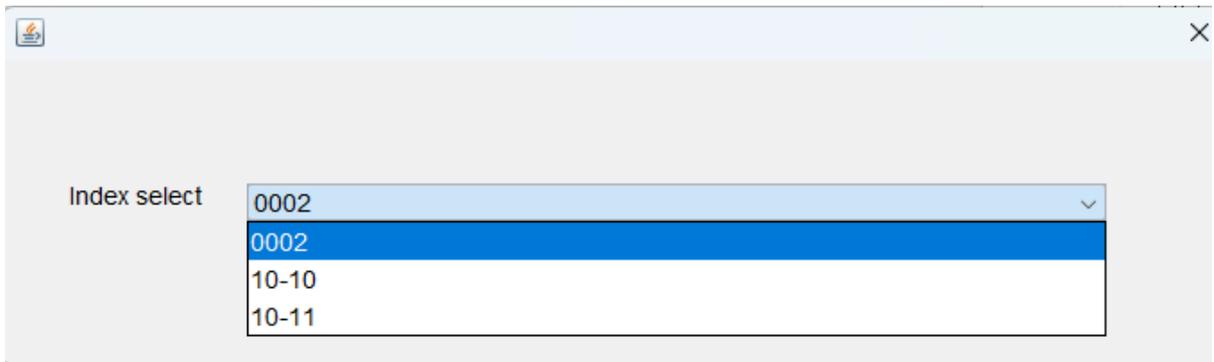
```
>> export(rpf,'pole')
```

pole_(0002).txt	2024/12/22 13:36	テキストドキュメント	67 KB
pole_(10-10).txt	2024/12/22 13:36	テキストドキュメント	67 KB
pole_(10-11).txt	2024/12/22 13:36	テキストドキュメント	67 KB

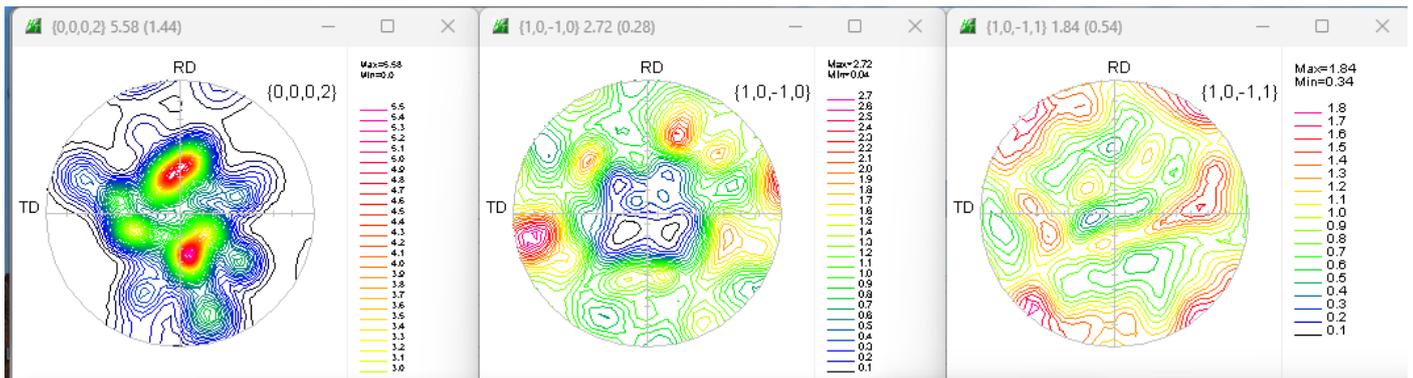
7. 1 ExportデータをTXT2に変換し表示



1面毎にTXT2に変換する。



Orthorhombicにも変換可能

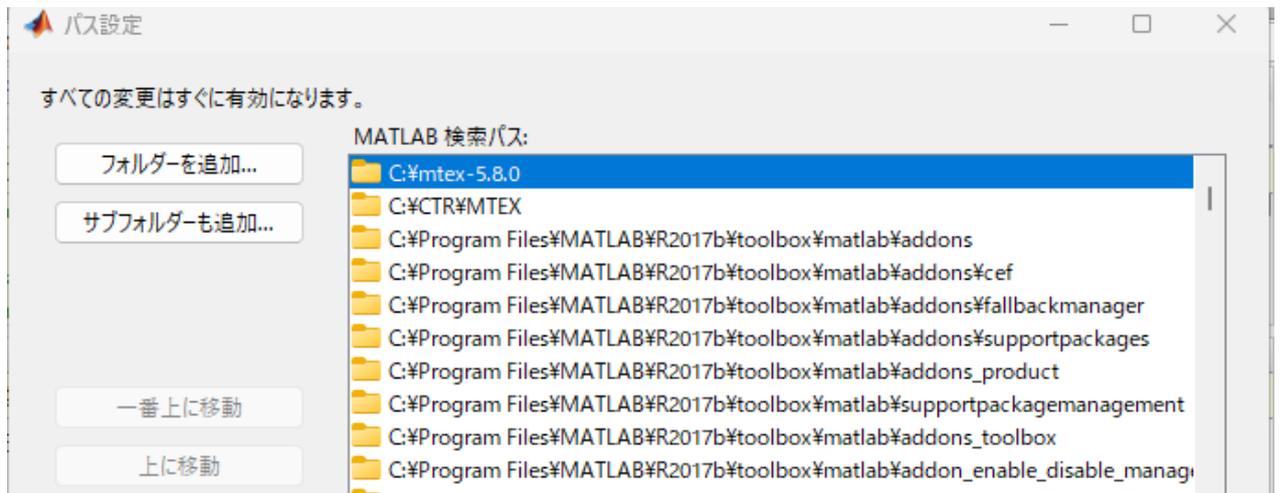


8. 逆極点図の E x p o r t

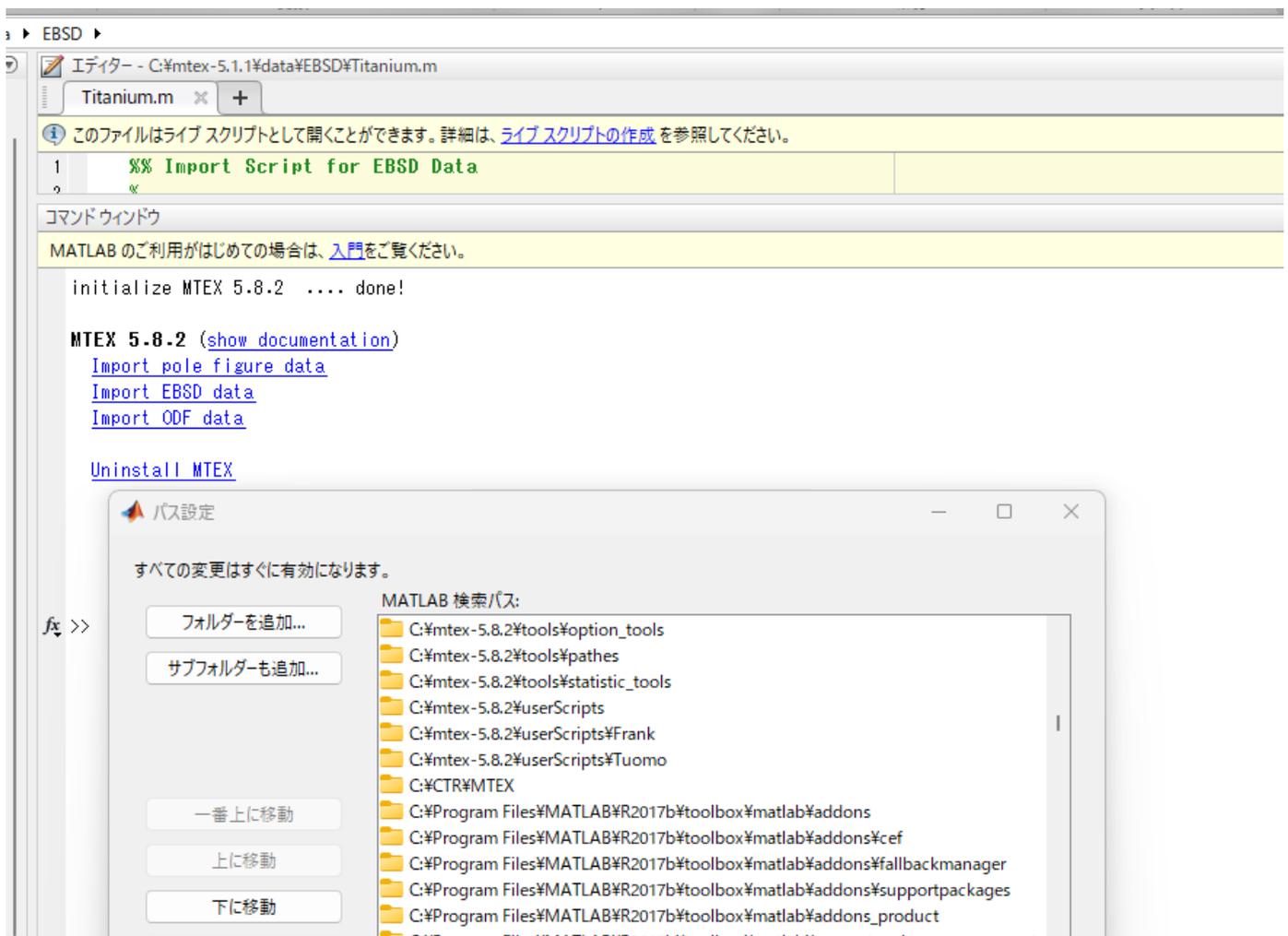
8. 1 逆極点 E x p o r t 用 m ファイルを読み込む

MTEX では、逆極点図の E x p o r t がサポートされていないため、CTR ソフトウェアの m ファイルを読み込み E x p o r t する。

MATLAB への外部 m ファイルの指定は最初に外部 m ファイル、次に MTEX となる。

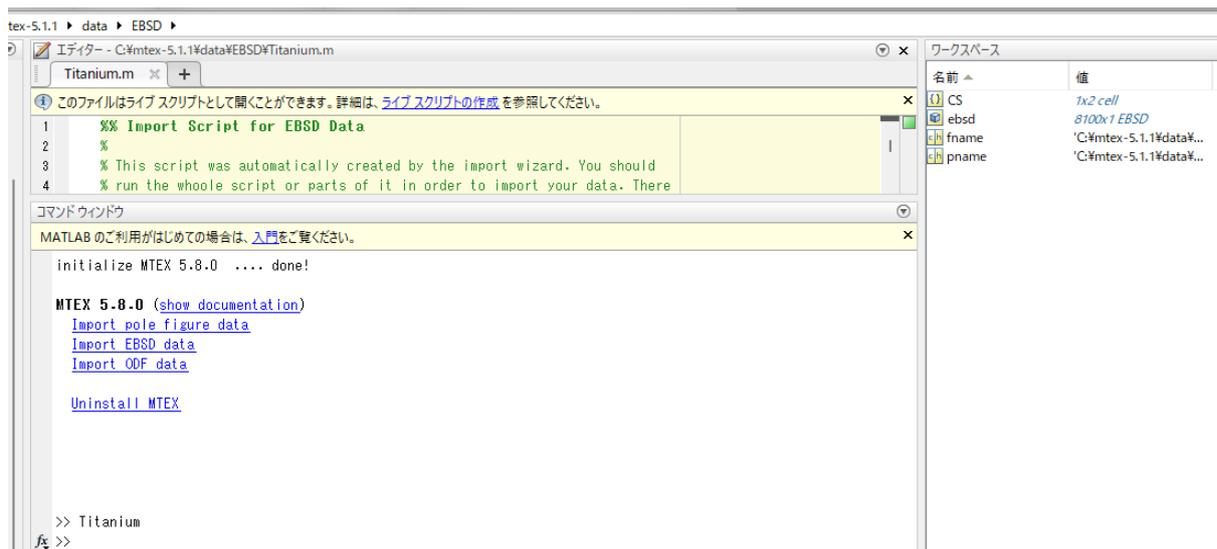


再読み込み



8. 2 Export

mtex-5.8.2では問題が発生したため、mtex5.8.0で処理
Titanium.mを実行

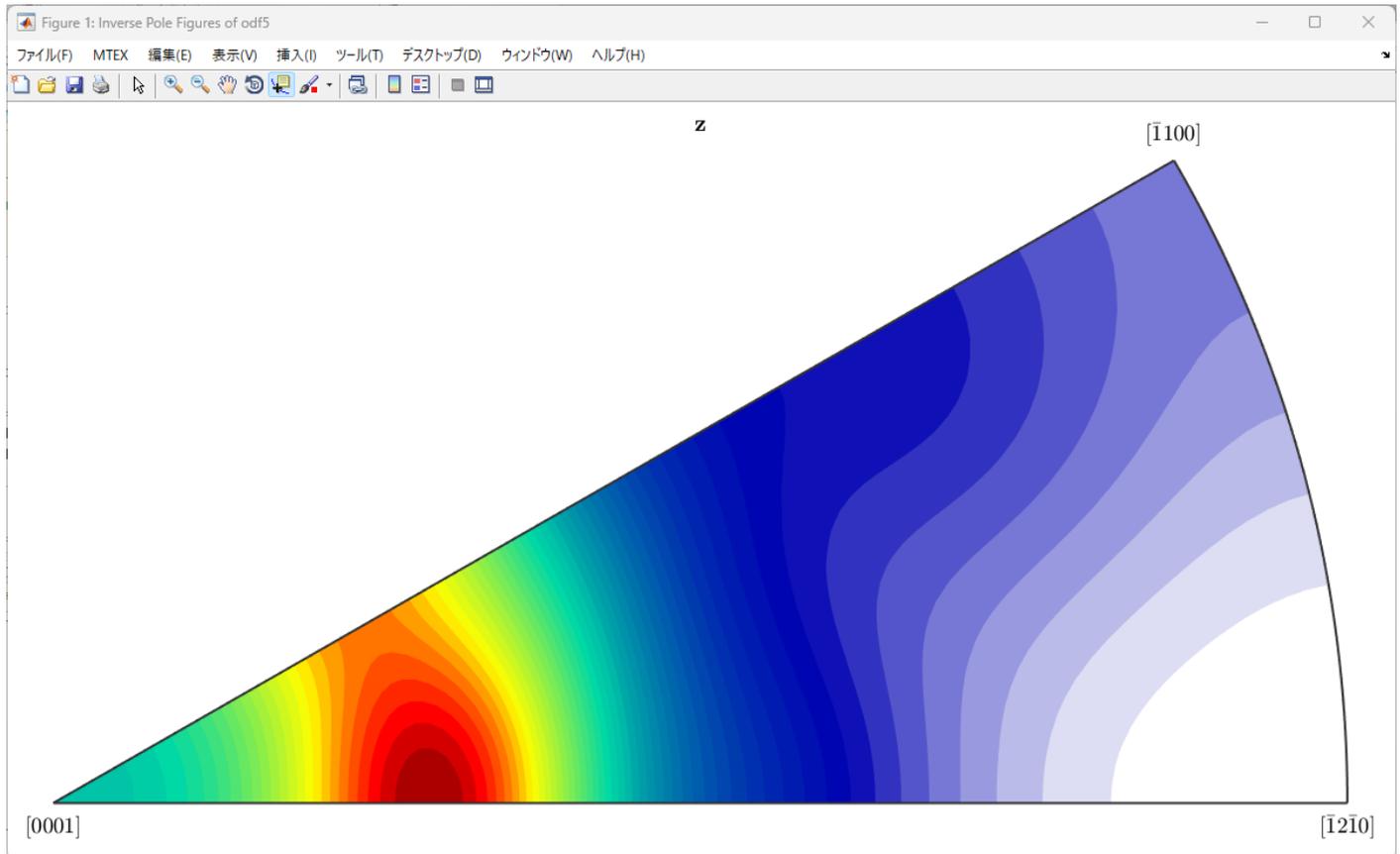


```
>> ans=ebstd('Titanium')
```

```
>> odf5=calcDensity(ans.orientations)
```

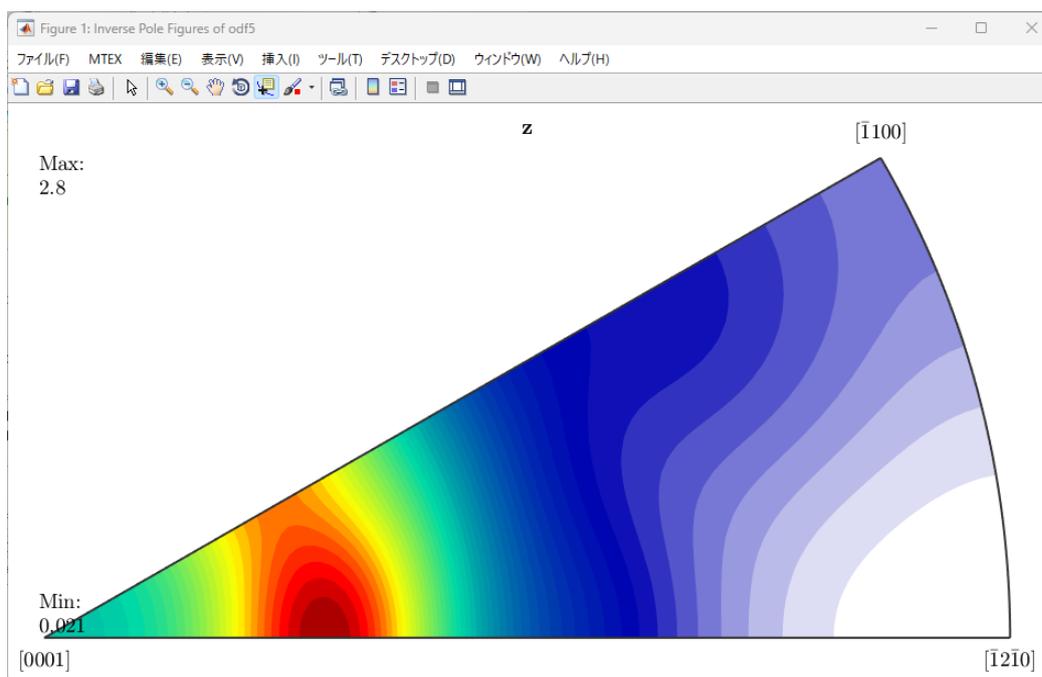
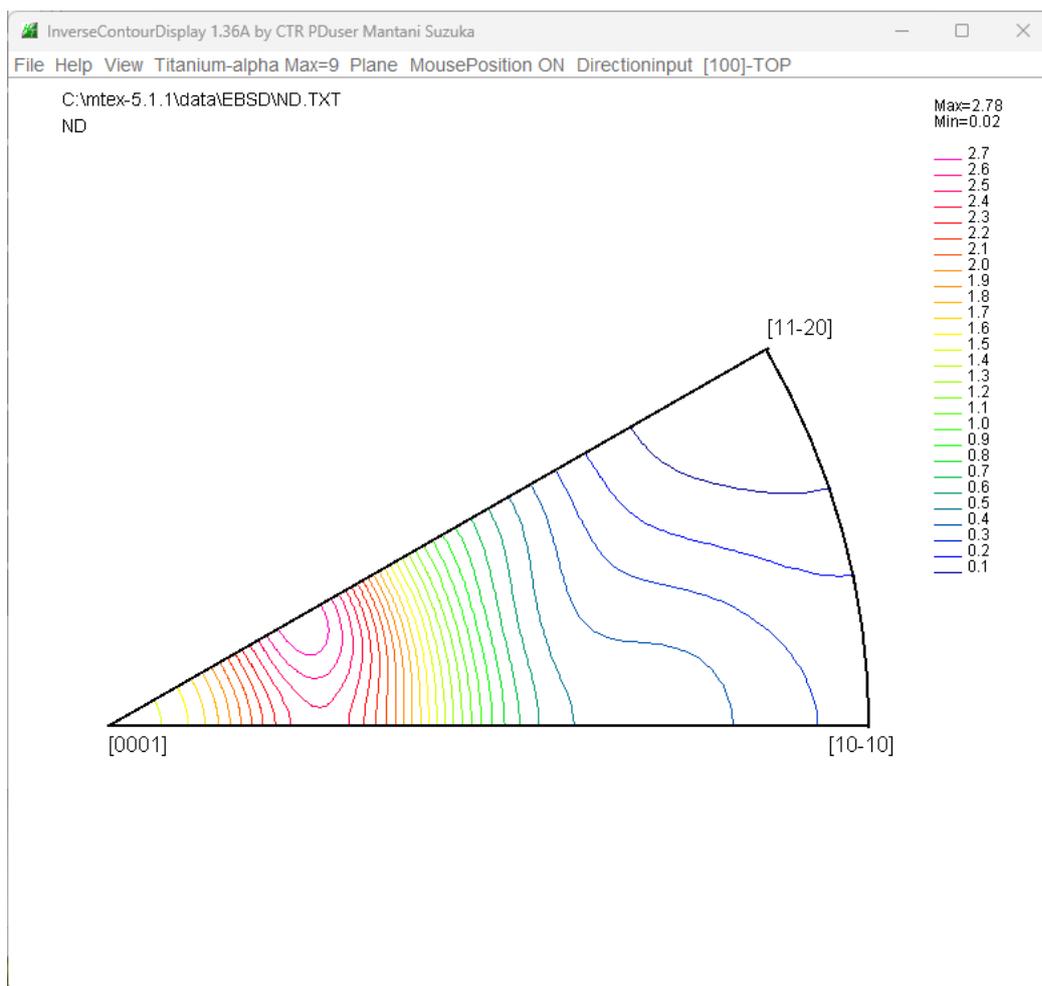
```
>> plotIPDF(odf5,zvector)
```

```
>> plotIPDF(odf5,zvector,'projection','eangle')
```



```
>> exportIPDF(odf5,zvector,'ND.TXT')
```

exportIPDF () は `mtex-5.8.2` でも可能であった。



軸が入れ替わって表示されている。

9. 方位のシュミレーション

TitaniumのTD-splitをシュミレーション

方位は $\{01-13\} \langle 2-1-10 \rangle$ $\{013\} \langle 100 \rangle$ とする

```
>> CS = crystalSymmetry('6/mmm', [2.95 2.95 4.686], 'mineral', 'Ti')
```

```
>> psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)
```

```
>> Ori1 = orientation.byMiller([0 1 3],[1 0 0],CS)
```

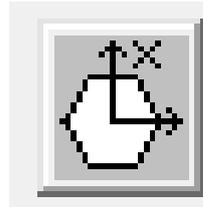
```
>> h = {Miller(0,0,2,CS),Miller(1,0,0,CS),Miller(1,0,1,CS)}
```

9. 1 ODFシュミレーション

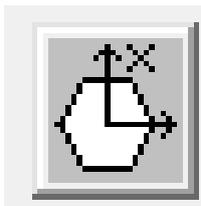
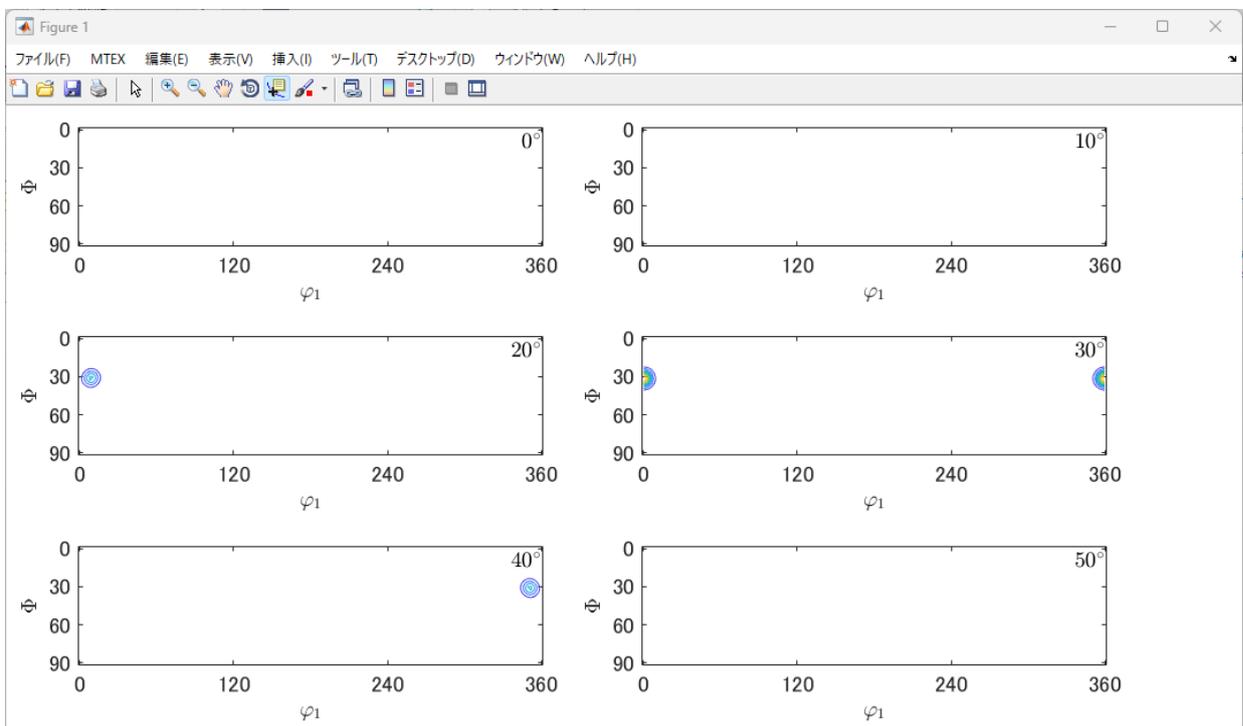
```
>> odf=unimodalODF(Ori1,psi)
```

```
odf = ODF (Ti → xyz)
```

Radially symmetric portion:
kernel: van Mises Fisher, halfwidth 5°
center: (0° ,31.4° ,30°)
weight: 1



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



で解析されている。

9. 2 極点図シュミレーション

```
>> rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

rpf = **PoleFigure**

crystal symmetry : Ti (6/mmm, X||a*, Y||b, Z||c*)

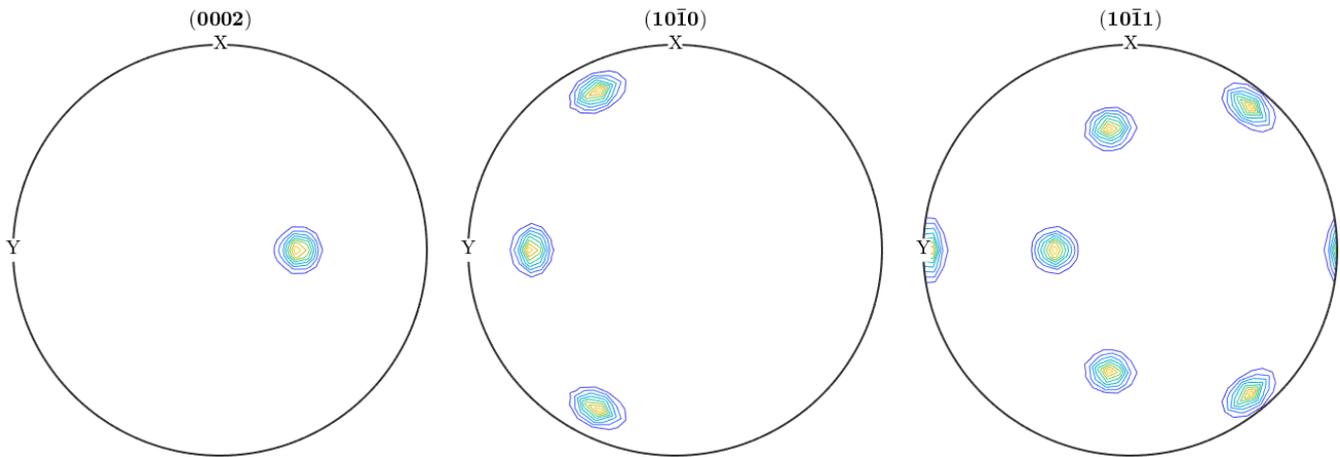
specimen symmetry: 1

h = (0002), r = 72 x 19 points

h = (10-10), r = 72 x 19 points

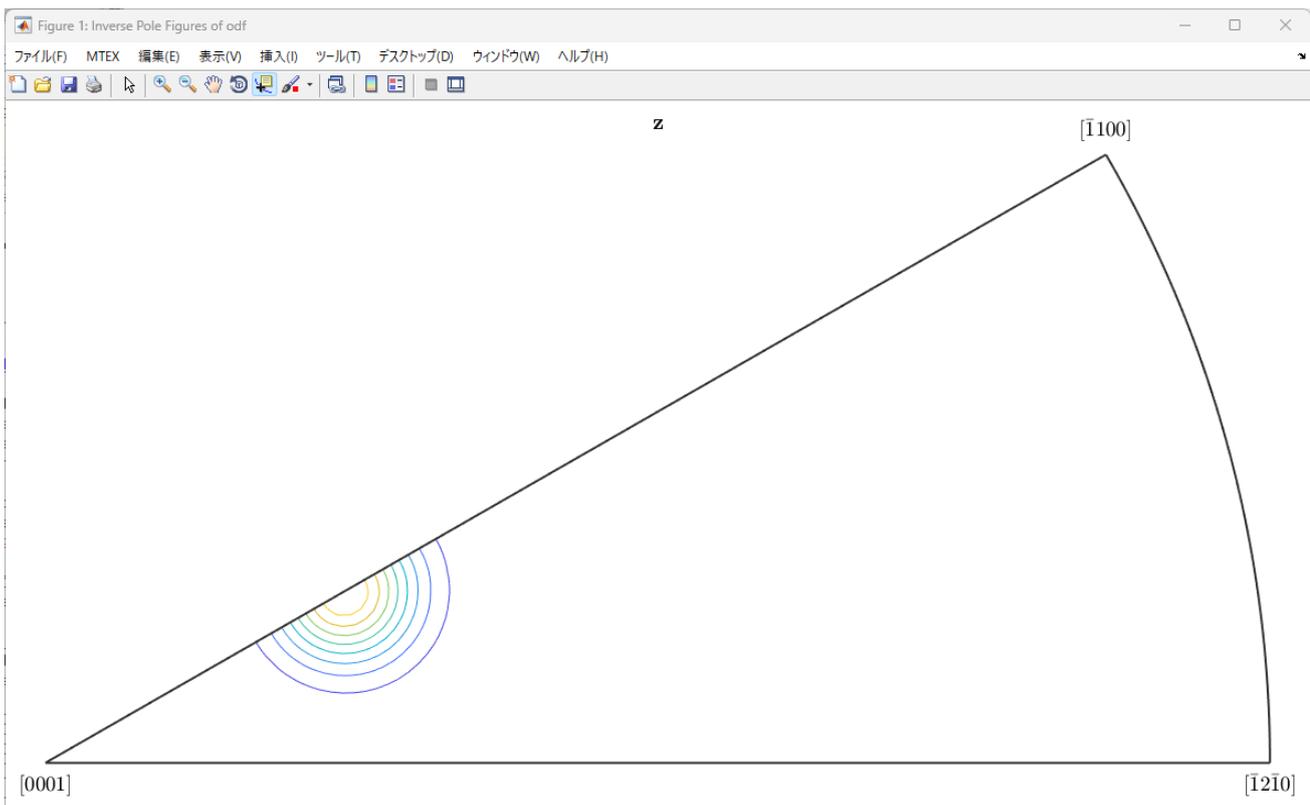
h = (10-11), r = 72 x 19 points

```
>> plot(rpf,'contour','projection','eangle')
```



9. 3 逆極点図シュミレーション

```
>> plotIPDF(odf,zvector,'contour','projection','eangle')
```



ND->zvector

RD->xvector

TD->yvector

10. cifデータのdownload

The screenshot shows the homepage of the Crystallography Open Database (COD). The browser address bar shows the URL crystallography.net/cod/. The page features a large logo with the letters 'COD' in blue and yellow circles. A left-hand navigation menu includes sections for 'COD Home', 'Accessing COD Data', 'Add Your Data', and 'Documentation'. The main content area describes the database as an open-access collection of crystal structures, excluding biopolymers, and mentions its origin at the University of Cambridge. It also provides statistics on the number of entries and the latest deposited structure. Below this, there is a 'CIFs Donators' section with logos of various institutions and an 'Advisory Board' section listing several names.

Crystallography Open Database

COD Home
Home
What's new?

Accessing COD Data
Browse
Search
Search by structural formula

Add Your Data
Deposit your data
Manage depositions
Manage/release prepublications

Documentation
COD Wiki
Obtaining COD
License
Privacy and GDPR
Querying COD
Citing COD
COD Mirrors
Advice to donators
Useful links

COD

Open-access collection of crystal structures of organic, inorganic, metal-organic compounds and minerals, excluding [biopolymers](#).
Including data and [software](#) from [CrystalEye](#), developed by Nick Day at the [department of Chemistry](#), the University of Cambridge under supervision of [Peter Murray-Rust](#).

All data on this site have been placed in the [public domain](#) by the contributors.

Currently there are **520562** entries in the COD.
Latest deposited structure: [1527600](#) on **2024-12-21** at **10:12:41 UTC**



[CIFs Donators](#)



Advisory Board
Daniel Chateigner, Xiaolong Chen, Marco Ciriotti,
Robert T. Downs, [Sylvie Grégoire](#), Werner Kasper, [Amel Le Bail](#), [Luca Lutterotti](#)

を使わせて頂きます。