MTEXにおける体積分率(VolumeFrraction)計算手順

2025年04月01日 *HelperTex Office*  1. 概要

MTEXはEBSD, XRDの汎用分散データ処理であり、手順が複雑である。 本資料ではXRDで測定されたデータからMTEXによる体積分率(VolumeFraction)の 解析手順を説明します。

説明に使用するデータ



2. 極点処理

🜌 (1,0,0) 15.1 C × 🜌 (1,1,0) 15.1 C × 🜌 (1,1,1) 11.3 C ×
🖬 ODFPoleFigure2 4.04 by CTR PDuser CTR CTR - 🗌 🗙
File Linear(absolute)Contour ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization
Files select ASC(RINT-PC) INDUctorWASC 110_bdt ASC 111_bdt ASC
Coloration Condition       hkl         Previous       Next       IVMTEXPlus-cube-goss-brass-copper/#ref¥100_txtCWASC       hkl         Backgroud delete mode       SingleMode       LowMode       HighMode       Nothing       BG defocus       DSH12mm*Schulz+RSH5mm       Minimum mo-         Minimum(α, β)       MinimumAverage(α)X       0.5       Trans blinds angle       30.0       RD       RD         Peak slit 7.0       mm       Peak slit 7.0 mm <td< td=""></td<>
🛛 Ref 🗌 Trans Schulz reflection method 🤍 Change Absorption coefficien 133.0 1/cm Thickness 0.2 Cm 🗸 Set 2Theta 0.0 dec. o 1/Kt Profile
Defocus file Select Trasmission defocus HKL+T
Obefocus(1) functions file  C4VCTR4DATA4Aluminum-H-04Al_random¥defocus¥DEFOCUS_F.TXT Make defocus function files by TXT2 Files   Inormalization degree of a polynomial   Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BE185mm Imit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)   Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH12mm*Schulz+RSH5mm
Smoothine for ADC       Cancel       Connect         Cycles       2       Weight       10       Disp       CTR       Connect       Asc       MTexAsc       Ras       TXT       TXT2       Exit&ODF       ODF         After connection       ValueODFVF-B       ValueODFVF-A       ValueODFVF-A       ValueODFVF-A
CTRHome : C: Select crystal : Cubic 25/04/01

# 3. MTEX入力データ作成

PFtoODF3 8.58 by CTR PDuser CTR CTR						_	
File Option Symmetric Software Dat	a Help						
Outside text(Vector) CCW	rralData txt				Initializ	e	itart
Outside CSV(Vector) CCW							
Inside text CCW	iles) Cif	7 - 0 (cub	ic)	~	0 e	etHKL<- Center /2	Filena
*LaboTex(EPF)CCW	alpha 90.0	beta 9	0.0 gar	nm 90.0		子 AllFik	sSel
Labotex(EPF) CW				J			
Standard ODF CCW	ŕ¥ref						
Siemens CCW	a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
TexTools(txt) CCW		1,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	
*TexTools(pol) CCW		1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	
TexTools(pol) CW		1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	
*TexTools(pol)CCW-zerocut		2,1,0	0.0		0.0	0.0	
TexTools(pol)CW-zerocut		2,1,1	0.0		0.0	0.0	
*popLA(RAW)CCW		3,1,1	0.0		0.0	0.0	
popLA(RAW)CW		4,0,0	0.0		0.0	0.0	
StandardODF2.5 CCW		3,3,1	0.0		0.0	0.0	
Bunge(PF) CCW		4,2,2	0.0		0.0	0.0	
MulTex(TD:beta=0)CCWTXT2		5,1,1	0.0		0.0	0.0	
*MTEX(ASC) CCW		5,2,1	0.0		0.0	0.0	0

### MTEXに読み込む

4.1 ホルダ指定

π-4	プロット	アプリ		
🗢 🔶 🔁 🖉	► I: ► MTEX	Plus-cube-goss-b	rass-co	opper 🕨 ref 🕨 MTEX
現在のフォルター			$\overline{\mathbf{v}}$	コマンド ウィンドウ
🗋 名前 ▲				>>
4 100R.ASC				>>
110R.ASC				>>
In 111R.ASC				>>

4.2 データ指定

Pole Figur	res FRSD O	DF Tencor			
Data				-	
		toolleeing	Hatoouceing H	04	
110R.ASC 111R.ASC					
	7				
Plot		<< Previo	ous Next >	»	Finis
Plot import_wi	zard	<< Previo	Next >	») [	Finis
Plot import_wi Import Wizard Crystal Ref	zard erence Frame	<< Previo	ous Next >	»	Finis
Plot import_wi Import Wizard Crystal Ref Crystal Symmetr Mineral	zard erence Frame	<< Previo	ous Next >	»	Finis
Plot import_wi Import Wizard Crystal Ref Crystal Symmetr Mineral Indexed	zard erence Frame y Not Indexed	<< Previo	Next >	») (	Finis
Plot import_wi Import Wizard Crystal Ref Crystal Symmetr Mineral Indexed mineral name plotting color	zard Ference Frame y O Not Indexed Aluminum		Load Cif File	»	Finis
Plot import_wi Import Wizard Prystal Ref Prystal Symmetre Mineral Indexed mineral name plotting color Crystal Coordin	zard erence Frame y O Not Indexed Aluminum		Load Cif File	»	Finis
Plot import_wi Import Wizard Crystal Ref Crystal Symmetr Mineral Indexed mineral name plotting color Crystal Coordin Point Group	zard i erence Frame y O Not Indexed Aluminum ate System m-3m		Load Cif File	»	Finis
Plot import_wi Import Wizard Crystal Ref Crystal Symmetr Mineral Indexed mineral name plotting color Crystal Coordin Point Group Axis Length	zard i erence Frame y Not Indexed Aluminum ate System m-3m a 4.04958	<< Previo	Load Cif File	>>	Finis

4.3 読み込みデータ

Minport Wizard	_		×
Import Data Select Method			
Summary of PoleFigure data to be imported:			
crystal symmetry: "m-3m" specimen symmetry: "1" h = (100), r = 73 x 16 points h = (110), r = 73 x 16 points h = (111), r = 73 x 16 points			
Import to			
<ul> <li>script (m-file)</li> <li>workspace variable</li> </ul>			
Plot << Previous	Next >>	Fini	sh

5. 読み込み実行



- 5.1 Orthorhombicに変更
  - >> SS = specimenSymmetry('orthorhombic')

SS = orthorhombic specimenSymmetry (show methods, plot)

- >> pf = PoleFigure.load(fname,h,CS,SS,'interface','xrd');
- 5.2 ODF 計算

>> odf=calcODF(pf)

Radially symmetric portion: kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5° center: 1224 orientations, resolution: 5° weight: 1

5.3 ODF 描画

>> plot(odf,'contour')



5. 4 最大方位密度表示

>> [value,ori]=max(odf,'numLocal',6) value = 70.3967 69.0619 32.5071 29.5214

ori = orientation (Aluminum -> xyz (mmm)) size: 1 x 4

Bunge Euler angles in degree

phi1	Phi	phi2	Inv.
341.192	0.0361972	18.9146	0
179.904	44.9611	180.075	0
144.73	44.9754	179.921	0
90.0612	36.1843	225.058	0

6個指定で4個表示されている。 しかし、euler角度がOrthorhombicの範囲外であるため 変換が必要 6 euler角度変換

Bunge Euler angles in degree

phi1	Phi	phi2	Inv.
341.192 0	0.0361972	18.9146	0
179.904	44.9611	180.075	0
144.73	44.9754	179.921	0
90.0612	36.1843	225.058	0

をエディターに貼り付けデータ保管

» <u>0</u>	10, , , , , , , , , , ,	20	40
Bunge Eu	ler angles	in degree↓	
phi1	Phi	phi2	Inv.↓
341.192	0.0361972	18.9146	0↓
179.904	44.9611	180.075	01
144.73	44.9754	179.921	0↓
90.0612	36.1843	225.058	O[EOF]

ASCデータを読み込んだホルダに保存

ファイル名(N):	Bunge_Euler_angles_in_degree
ファイルの種類(T):	テキストファイル (*.txt)

6. 1 newCubicCODispによる変換

He Help Symmetry Special Index Task Miller Indices (hkl)[uvw] 0 ~ 0 ~ 1 ~ 1 ~ 0 ~ 0 ~ TD:[010] Calc PoleFigure & ODF & Inverse FWHM 5 deg Gratio 1.0  Corentzcut(Max/20) Polefigure 001 ~ 0 0ther 1.2.3 PF OrthoPF calcODF OrthoODF Inverse ND ~ Inv Disp Euler Angle (p1 P p2) <=90 0.0 0.0 0.0 Calc toOrthorhombic Present Condition Euler Angle 341.192 0.036 18.91 入力データ Double Miller Indices 2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4 DISP Position 10 ~ Disp size 400 ~ DISP BG color Black ~ Line size 2.0 ~ Minus	NewCubicCODisp 1.36 by CTR PDuser CTR CTR — 🛛 🗙
Miller Indices (hkl)[uvw] 0 ~ 0 ~ 1 ~ 1 ~ 0 ~ 0 ~ TD:[010] Calc PoleFigure & ODF & Inverse FWHM 5 deg Gratio 1.0 Clorentzcut(Max/20) Polefigure 001 ~ 0 ther 1.2.3 PF OrthoPF calcODF OrthoODF Inverse ND ~ Inv.Disp Euler Angle (p1 P p2) <=90 0.0 0.0 0.0 Calc toOrthorhombic Present Condition Euler Angle 341.192 0.036 18.91 入力データ Double Miller Indices 2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4 DISP Position 10 ~ Disp size 400 ~ DISP BG color Black ~ Line size 2.0 ~ Minus	Help Symmetry Special Index Task
<pre>(hkl)[uvw] 0 → 0 → 1 → 1 → 0 → 0 → TD:[010] Calc PoleFigure &amp; ODF &amp; Inverse FWHM 5 deg Gratio 1.0 ✓ Lorentzcut(Max/20) Polefigure 001 → 00ther 1.2.3 PF OrthoPF calcODF OrthoODF Inverse ND → Inv.Disp Euler Angle (p1 P p2) &lt;=90 0.0 0.0 0.0 0.0 Calc toOrthorhombic Present Condition Euler Angle 341.192 0.036 18.91 入力データ Double Miller Indices 2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4 DISP Position 10 → Disp size 400 → DISP BG color Black → Line size 2.0 → Minus</pre>	iller Indices
PoleFigure & ODF & Inverse FWHM 5 deg Gratio 1.0 Clorentzcut(Max/20) Polefigure 001 ~ Other 1.2.3 PF OrthoPF calcODF OrthoODF Inverse ND ~ Inv.Disp Euler Angle (p1 P p2) <=90 0.0 0.0 0.0 Calc toOrthorhombic Present Condition Euler Angle 341.192 0.036 18.91 入力データ Double Miller Indices 2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4 DISP Position 10 ~ Disp size 400 ~ DISP BG color Black ~ Line size 2.0 ~ Minus	hkl)[uvw] $0 \rightarrow 0 \rightarrow 1 \rightarrow 1 \rightarrow 0 \rightarrow 0 \rightarrow \text{TD}$ [010] Gale
FWHM 5 deg Gratio 1.0 Clorentzcut(Max/20) Polefigure 001 ~ Other 1.2.3         PF       OrthoPF       calcODF       OrthoODF       Inverse       ND ~ Inv.Disp         Euler Angle       (p1 P p2) <=90	PoleFigure & ODF & Inverse
PF OrthoPF calcODF OrthoODF Inverse ND v Inv.Disp Euler Angle (p1 P p2) <=90 0.0 0.0 0.0 Calc toOrthorhombic Present Condition Euler Angle 341.192 0.036 18.91 入力データ Double Miller Indices 2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4 DISP Position 10 v Disp size 400 v DISP BG color Black v Line size 2.0 v Minus	FWHM 5 deg Gratio 1.0 Corentzcut(Max/20) Polefigure 001 V Other 1.2.3
Euler Angle         (p1 P p2) <=90	PF         OrthoPF         calcODF         OrthoODF         Inverse         ND         Inv.Disp
(p1 P p2) <=90 0.0 0.0 0.0 Calc toOrthorhombic Present Condition Euler Angle 341.192 0.036 18.91 入力データ Double Miller Indices 2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4 DISP Position 10 ∨ Disp size 400 ∨ DISP BG color Black ∨ Line size 2.0 ∨ Minus	uler Angle
Present Condition Euler Angle 341.192 0.036 18.91 入力データ Double Miller Indices 2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4 DISP Position 10   Disp size 400   DISP BG color Black   Line size 2.0   Minus	p1 P p2) <=90 0.0 0.0 0.0 Calc toOrthorhombic
Euler Angle       341.192 0.036 18.91       入力データ         Double Miller Indices       2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4         DISP       Position 10 v Disp size       400 v Disp         BG color Black v Line size       2.0 v Minus	resent Condition
341.192 0.036 18.91     入力データ       Double Miller Indices     2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4       DISP       Position     10        BG color     Black        Line size     2.0       Minus	Euler Angle
Double Miller Indices         2.0E-4         6.0E-4         1.0         -0.0018         -2.0E-4           DISP	341.192 0.036 18.91 入力データ
2.0E-4       6.0E-4       1.0       -0.0018       -2.0E-4         DISP       Position       10       >       Disp size       400       >       DISP         BG color       Black       >       Line size       2.0       >       Minus	Double Miller Indices
DISP       Position     10       BG color     Black       Vinue     Line size       2.0     Minue	2.0E-4 6.0E-4 1.0 1.0 -0.0018 -2.0E-4
DISP       Position     10     >     Disp size     400     >     DISP       BG color     Black     >     Line size     2.0     >     Minus	
Position10Disp size400DISPBG colorBlackLine size2.0Minus	JISP
BG color Black V Line size 2.0 V Minus	Position 10 V Disp size 400 V DISP
	BG color Black V Line size 2.0 V Minus
Makefileholder	Makefileholder
Holder C-¥CTR¥WO RK¥NewCubicCO Disp	Holder C:#CTR#WORK#NewCubicCODisp

341.192 0.0361972 18.9146 —> (001) [100] が計算される。

✓ NewCubicCODisp 1.36 by CTR PDuser CTR CTR
File Help Symmetry Special Index Task
Miller Indices       Image: Miller Indices         (hkl)[uvw]       0       1       1       0       0       TD:[01-1]       Calc         PoleFigure & ODF & Inverse       Image: Miller Indices       Image: Miller Indices       Image: Miller Indices       Image: Miller Indices         FWHM       5       Ideg: Gratio       1       Image: Miller Indices       Image: Miller Indices         FWHM       5       Ideg: Gratio       1       Image: Miller Indices       Image: Miller Indices
PF OrthoPF calcODF OrthoODF Inverse ND V Inv.Disp
Euler Angle
(p1 P p2) <=90 0.0 45.0 0.0 Cale toOrthorhombic
Present Condition Euler Angle 179.904 44.9611 180.075 Double Miller Indices -9.0E-4 -0.7066 0.7076 1.0 -1.0E-4 0.0012
DISP
Position 10 Disp size 400 V DISP
BG color Black v Line size 2.0 v Minus
Makefileholder
Holder C:¥CTR¥WORK¥NewCubicCODisp

## 179.904 44.9611 180.075 から(011)[100]が計算される。

MewCubicCODisp 1.36 by CTR PDuser CTR CTR — — — X
File Help Symmetry Special Index Task
Miller Indices
(hkl)[uvw] 0 ~ 1 ~ 1 ~ 2 ~ -1 ~ 1 ~ TD:[11-1] Calc
FWHM       5       deg       Gratio       1.0        Corentzcut(Max/20)       Polefigure       001        Other       1.2.3
PF OrthoPF calcODF OrthoODF Inverse ND V Inv.Disp
Euler Angle         (p1 P p2) <=90         35.2644         45.0         0.0         Calc         toOrthorhombic
Present Condition Euler Angle 144.73 44.9754 179.921
Double Miller Indices 0.001 -0.7068 0.7074 0.8159 0.4096 0.4081
DISP
Position 10 V Disp size 400 V DISP
BG color Black ~ Line size 2.0 ~ Minus
Makefileholder Holder C:¥CTR¥WORK¥NewCubicCODisp

144.73 44.9754 179.921 から(011)[2-1-1]が計算される。

NewCubicCODisp 1.36 by CTR PDuser CTR CTR	- 🗆 ×
le Help Symmetry Special Index Task	
Miller Indices         (hkl)[uvw]       1       1       2       -1       -1       1       TD:[1-10]         PoleFigure & ODF & Inverse       FWHM       5       deg       Gratio       1.0       Inverse       Inverse       001         PF       OrthoPF       calcODF       OrthoODF       Inverse       ND	Calc Calc Other 1.2.3
Euler Angle         (p1 P p2) <=90	le toOrthorhombic
0.4082 0.4082 0.8165 -0.5774 -0.5774 0.5774	
DISP	
Position 10 V Disp size 400 V DISP	
BG color Black V Line size 2.0 V Minus	
Makefileholder	
Holder C.¥CTR¥WORK¥NewCubicCODisp	

90.0612 36.1843 225.058 から (112) [-1-11] が計算される。

7. VolumeFraction計算

341.192 (	0.0361972	18.9146 —> (001) [100] が計算される。
179.904	44.9611	180.075 から(011)[100] が計算される。
144.73	44.9754	179.921 から(011)[2-1-1] が計算される。←
90.0612	36.1843	225.058 から(1 1 2)[- 1 - 1 1] が計算される。。
各方位のVolume	Fractio	nを求める。

```
>> goss= orientation.byMiller([0 1 1],[1 0 0],CS,SS)
>>volume(odf,goss,15*degree)
    progress: 100%
    ans = 0.2492
```

この作業は煩わしいので次のソフトウエアを作成しました。

8. euler角度からMTEXのコマンドを作成する。

6項でeuler角度のファイルを作成してある。

このファイルからVolumeFractuion用コマンドを作成する 8.1入力

1	الله MTEXeulertoHKL	_	$\times$
I	File Help		
	MTEX-eulerfile		 
K	MTEX-txt		
	· ·		
	volume(odf, ori, angle*degree) angle : 15	Calc	

## 8.2 計算を行う

🛓 MTEXeulertoHKL						_		×
File Help								
MTEX-eulerfile								
MTEX-txt	I:¥MTEXPlus-	cube-goss-bra	ass-copper¥ref¥	MTEX¥Bunge	e_Euler_angle:	s_in_degree	txt	
Bunge Euler angles phi1 Phi 341.192 0.0361972 179904 44.9611 144.73 44.9754 90.0612 36.1843	⇒ in degree phi2 Inv. 18.9146 180.075 179.921 225.058	0 0 0						
volume(odf, ori	, angle*degi	ree)	angle : 15			Calc	$\bigcirc$	)

#### 8.3 計算結果

MTEXeulertoHKL	—		×
File Help			
MTEX-eulerfile	in degree	e txt	
Bunge Euler angles in degree phil Phi phi2 Inv. 341192.00361072 189146 0			
179.904       44.9611       180.075       0         144.73       44.9754       179.921       0         90.0612       36.1843       225.058       0         0.0       0.0       0.0       (0 0 1)[1 0 0]         0.0       45.0       0.0       (0 1 1)[1 0 0]         35.264       45.0       0.0       (0 1 1)[2 -1 1]			
90.0 35.264 45.0 (1 1 2)[-1 - 1 1] ori0=orientation byMiller([0 0 1],[1 0 0],CS,SS) volume(odf,ori0,15*degree) ori1=orientation byMiller([0 1 1],[1 0 0],CS,SS) volume(odf,ori1,15*degree) ori2=orientation byMiller([0 1 1],[2 - 1 1],CS,SS) volume(odf,ori3,15*degree) ori3=orientation byMiller([1 1 2],[-1 - 1 1],CS,SS) volume(odf,ori3,15*degree)			
volume(odf, ori, angle*degree) angle : 15	Calc		

計算と同時に結果ファイル(result.txt)が作成されています。

8.4 エディターでresult.txtを読み込む

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 検索(S) ウィンドウ(W) マクロ(M) その他(O)
📑 🗀 📲 🤜 🖂 🚝 🍳 🔍 📢 🛀 🚍 🤮
▶0
oriO=orientation.byMiller([0 0 1],[1 0 0],CS,SS)↓ volume(odf,oriO,15*degree)↓ ori1=orientation.byMiller([0 1 1],[1 0 0],CS,SS)↓ volume(odf,ori1,15*degree)↓ ori2=orientation.byMiller([0 1 1],[2 -1 1],CS,SS)↓ volume(odf,ori2,15*degree)↓ ori3=orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS,SS)↓ volume(odf,ori3,15*degree)↓ ↓

[EOF]

この部分を切り取りMTEXに張り付ける

8. 4 VolumeFraction計算

```
>> ori0=orientation.byMiller([0 0 1],[1 0 0],CS,SS)
volume(odf,ori0,15*degree)
ori1=orientation.byMiller([0 1 1],[1 0 0],CS,SS)
volume(odf,ori1,15*degree)
ori2=orientation.byMiller([0 1 1],[2 -1 1],CS,SS)
volume(odf,ori2,15*degree)
ori3=orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS,SS)
volume(odf,ori3,15*degree)
```

```
ori0 = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
```

Bunge Euler angles in degree

phi1 Phi phi2 Inv. 0 0 0 0 progress: 100% ans = 0.2197

```
ori1 = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
```

Bunge Euler angles in degree

phi1 Phi phi2 Inv.

0 45 0 0 progress: 100% ans = 0.2492

```
ori2 = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
Bunge Euler angles in degree
phi1 Phi phi2 Inv.
35.2644 45 0 0
progress: 100%
ans = 0.2259
```

```
ori3 = orientation (Aluminum -> xyz (mmm))
Bunge Euler angles in degree
phi1 Phi phi2 Inv.
90 35.2644 45 0
progress: 100%
ans = 0.1992
```

同様の結果が得られます。

#### 9. ODF図から方位の決定

volumeで方位の抽出を行っていたが、ODFをExportする事で候補の絞り込みが可能

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







r a n d o m = 0 %

