

# MTEXにおける体積分率 (Volume Fraction) 計算手順

2025年04月01日

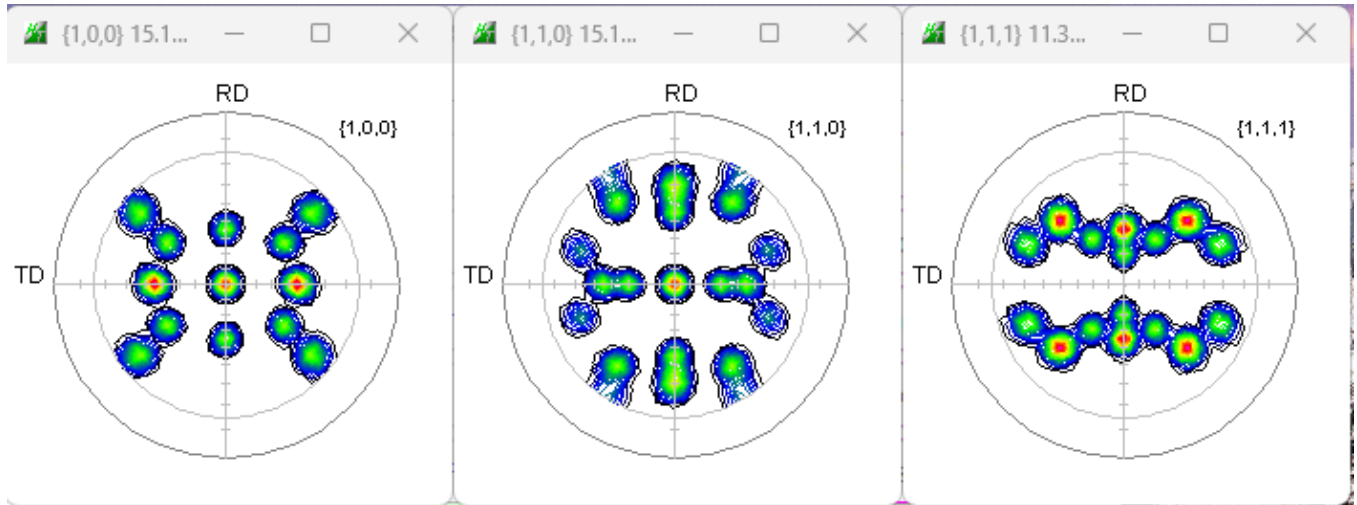
*HelperTex Office*

## 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 (Volume Fraction) 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

バックグラウンド削除、defocus補正を行う

The screenshot shows the ODFPolefigure2.4.04 software interface. At the top, three circular pole figures are displayed for different hkl values: (1,0,0), (1,1,0), and (1,1,1). The background of the software window is a landscape image of a mountain range. The main interface contains several sections for configuration:

- Files select:** ASC(RINT-PC) and 100\_txtCWASC 110\_txtASC 111\_txtASC
- Calculation Condition:** Previous, Next, [X]MTEXPlus-cube-goss-brass-copper#ref#100\_txtCWASC, hkl: 1,0,0
- Background delete mode:** DoubleMo... SingleMode LowMode HighMode Nothing (selected), BG defocus: DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm, Minimum mo... (unchecked)
- Smoothing:** +α 3, Arithmetic mean, Disp
- Peak slit:** 7.0 mm, BG Slit: 7.0 mm, PeakSlit / BGS... BG Scope: 80.0 deg, 90.0 deg
- AbsCalc:** Ref, Trans, Schulz reflection method, Absorption coefficient: 133.0 1/cm, Thickness: 0.2 cm, 2Theta: 0.0 deg, 1/Kt (selected), Profile
- Defocus file Select:** Defocus(1) functions file: C:\CTR#DATA\Aluminum-H-O#Al\_random#defocus#DEFOCUS.F.TXT, Make defocus function files by TXT2, Files, Normalization, degree of a polynomial: 0, TenckhoffFitting, TextDisp
- Limit Alfa Defocus value:** Free(LimitValue=0.0)
- Search minimum EqualAngleRp(Cubic only):** 1/Ra, Profile
- Smoothing for ADC:** Cycles: 2, Weight: 10, Disp, After connection (unchecked)
- Normalization:** CTR (checked), Connect, Average
- CenterData:** Center α=0 (unchecked)
- OutFiles:** Asc, MTeXAsc, Ras, TXT, TXT2 (selected)
- Buttons:** Cancel, Calc, Connect, Exit8ODF, ODF, ValueODFVF-B, ValueODFVF-A
- Status bar:** CTRHome : C, Select crystal : Cubic, 25/04/01

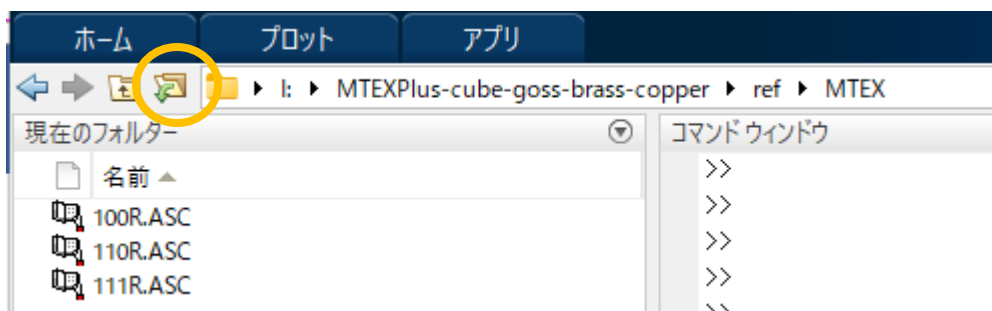
## 3. MTEX入力データ作成

The screenshot shows the PftoODF3 8.58 software interface. The main window displays a list of data sources on the left and a table of hkl values with associated parameters on the right. The table has columns for h,k,l, 2Theta, Alpha scope, AlphaS, AlphaE, and a Select checkbox.

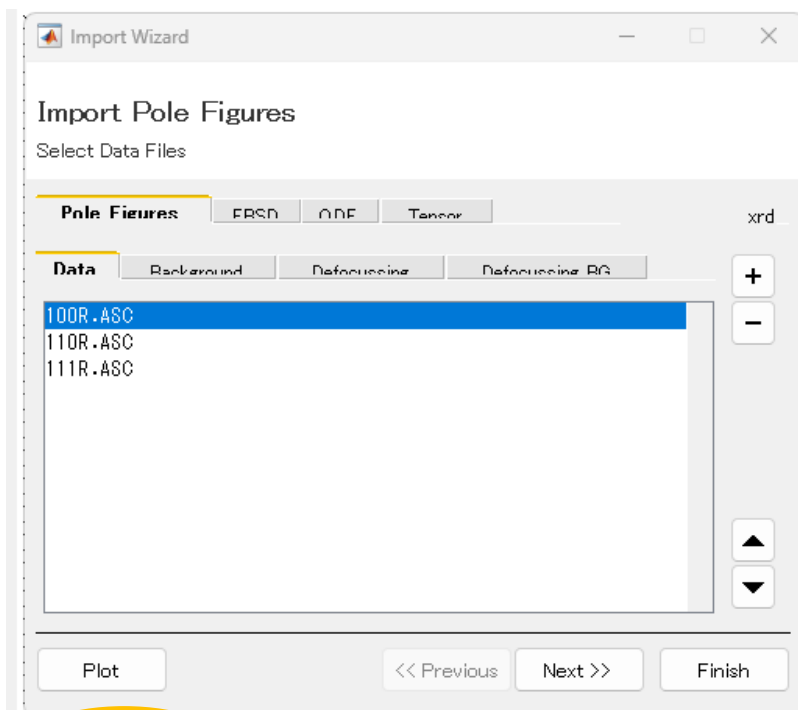
Source	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
*MTEX(ASC) CCW	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
MulTex(TD:beta=0)CCWTXT2	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
Bunge(PF) CCW	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
StandardODF2.5 CCW	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
popLA(RAW)CW	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
*popLA(RAW)CCW	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
TexTools(pol)CW-zero-cut	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
*TexTools(pol)CCW-zero-cut	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
TexTools(pol)CW	1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
*TexTools(pol)CCW	1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
TexTools(txt) CCW	1,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
Siemens CCW						
Standard ODF CCW						
Labotex(EPF) CW						
*LaboTex(EPF)CCW						
Inside text CCW						
Outside CSV(Vector) CCW						
Outside text(Vector) CCW						

#### 4. MTEXに読み込む

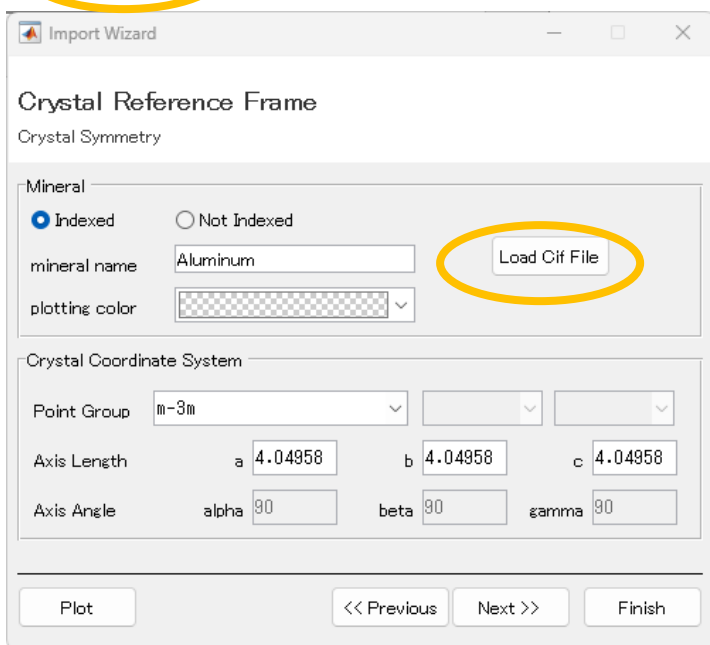
##### 4. 1 ホルダ指定



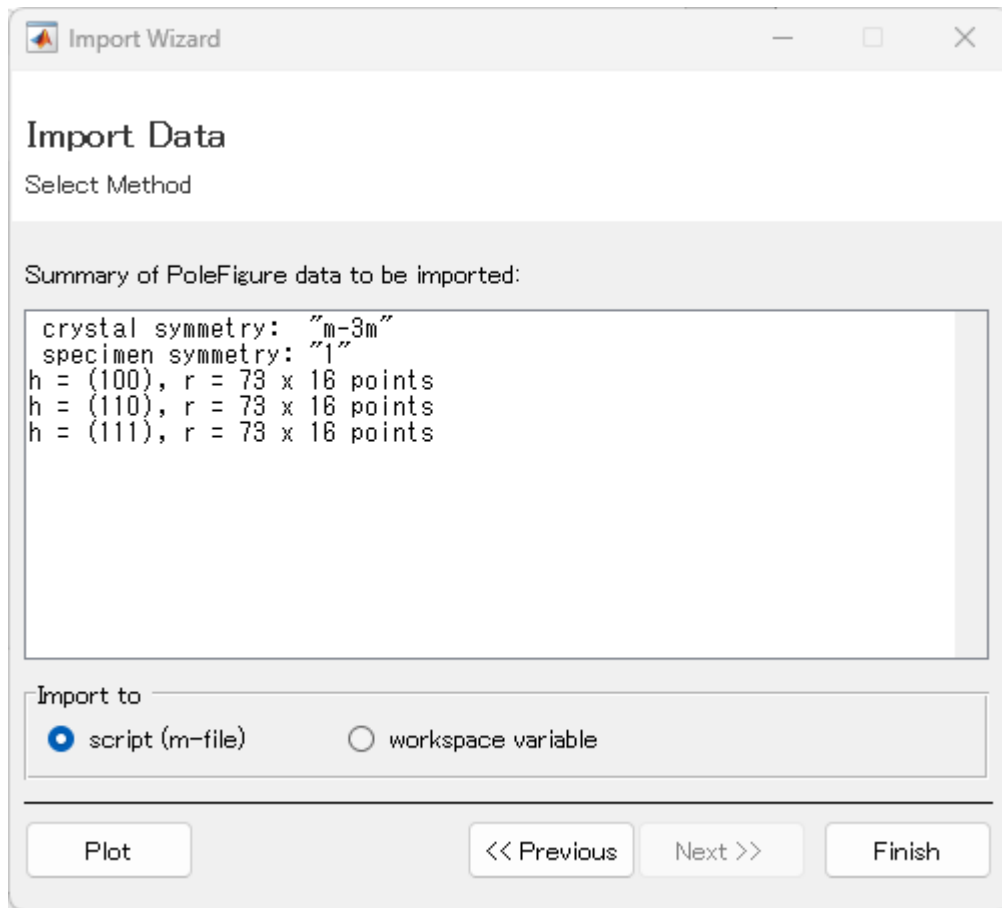
##### 4. 2 データ指定



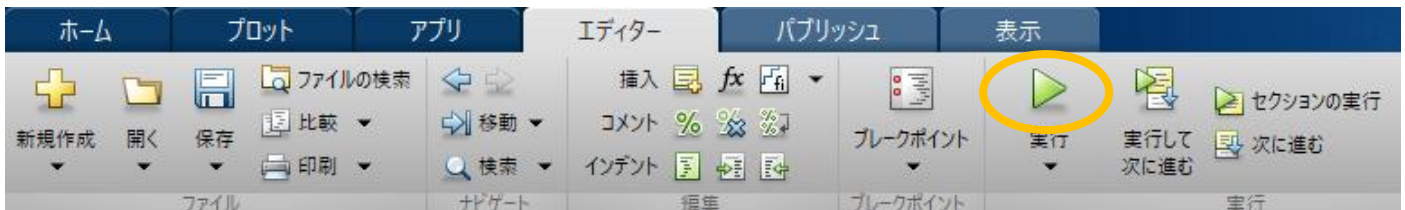
> import\_wizard



#### 4. 3 読み込みデータ



#### 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

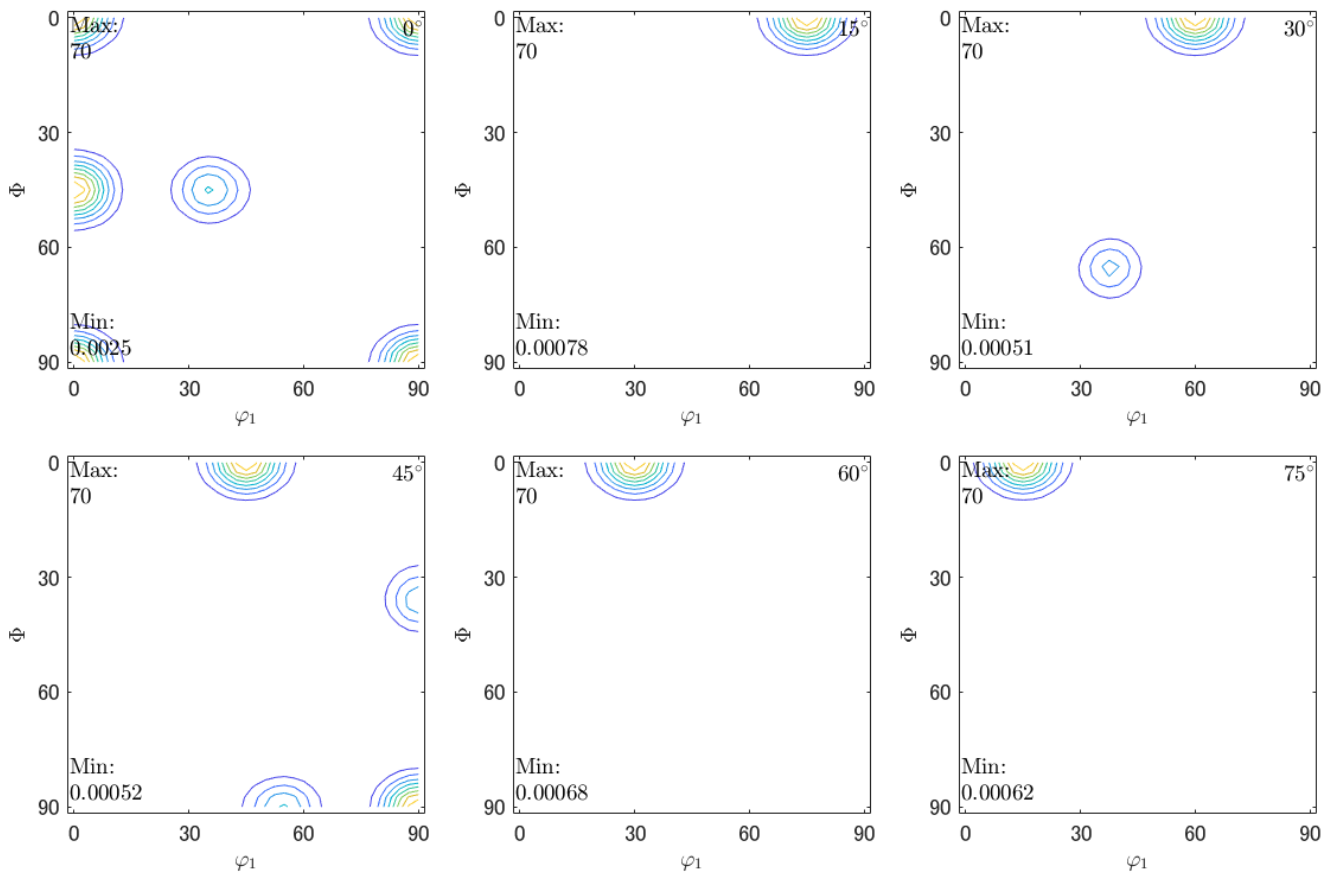
```
>> odf=calcODF(pf)
```

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

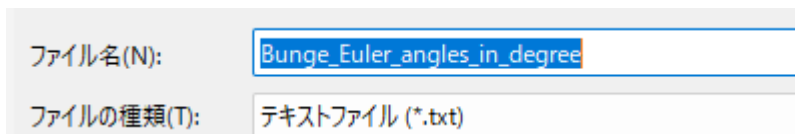
phi1	Phi	phi2	Inv.
341.192	0.0361972	18.9146	0
179.904	44.9611	180.075	0
144.73	44.9754	179.921	0
90.0612	36.1843	225.058	0

をエディターに貼り付けデータ保管

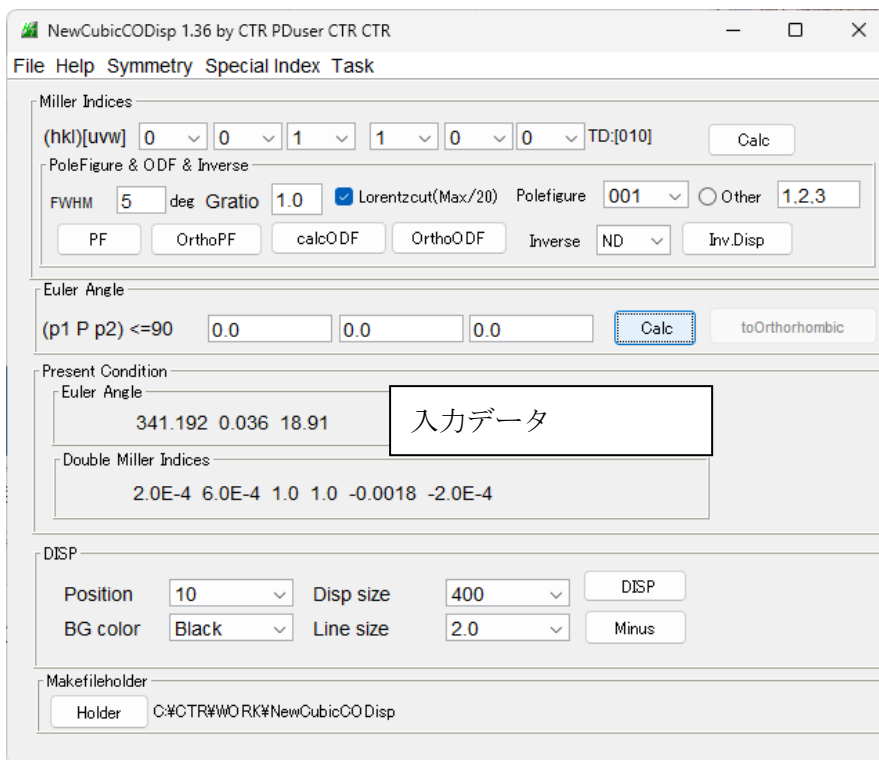
```

>0 10 20 30 40
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[EOF]
  
```

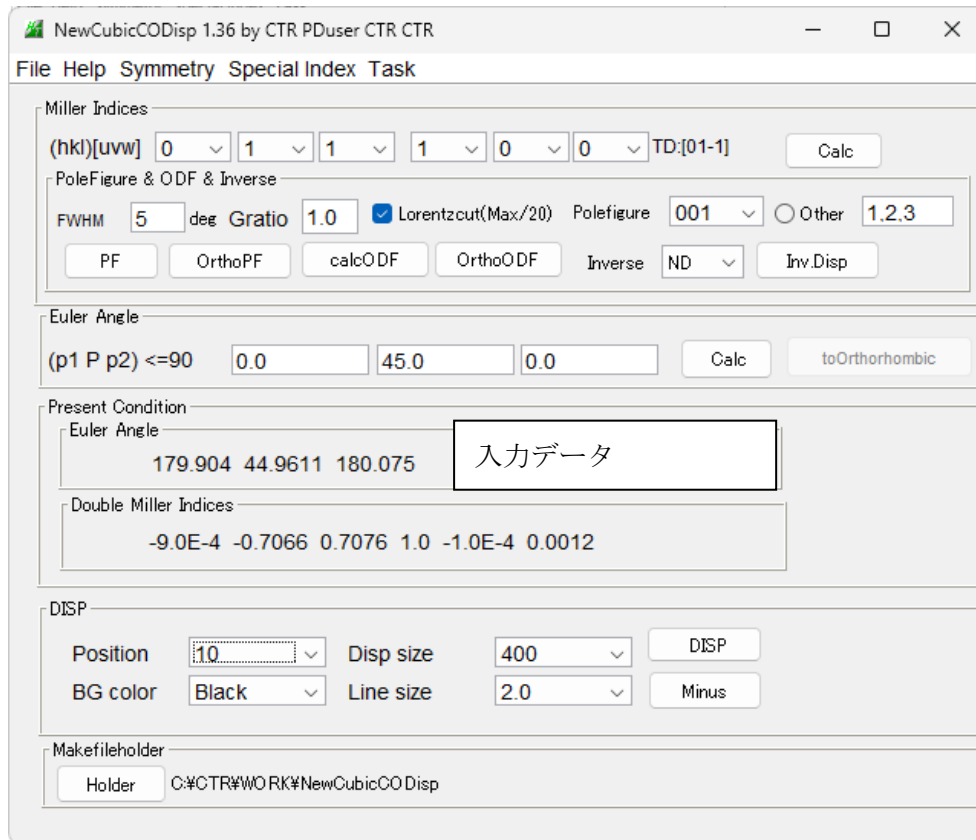
A S Cデータを読み込んだホルダに保存



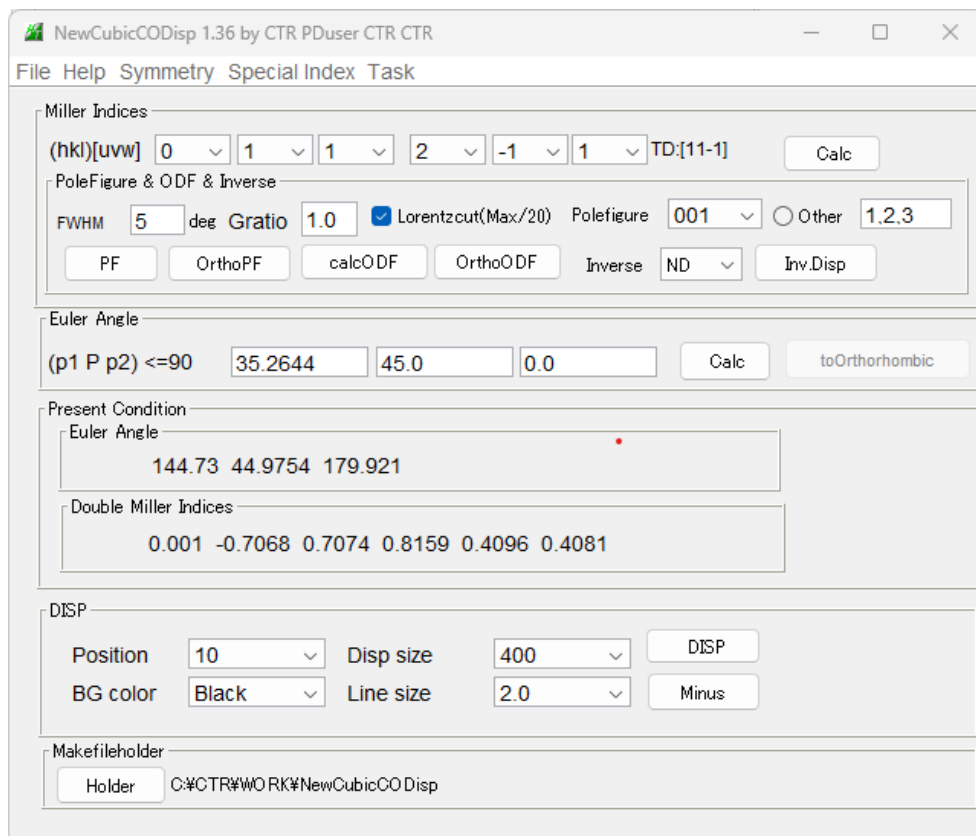
### 6. 1 newCubicCODispによる変換



341.192 0.0361972 18.9146 → (0 0 1) [1 0 0] が計算される。

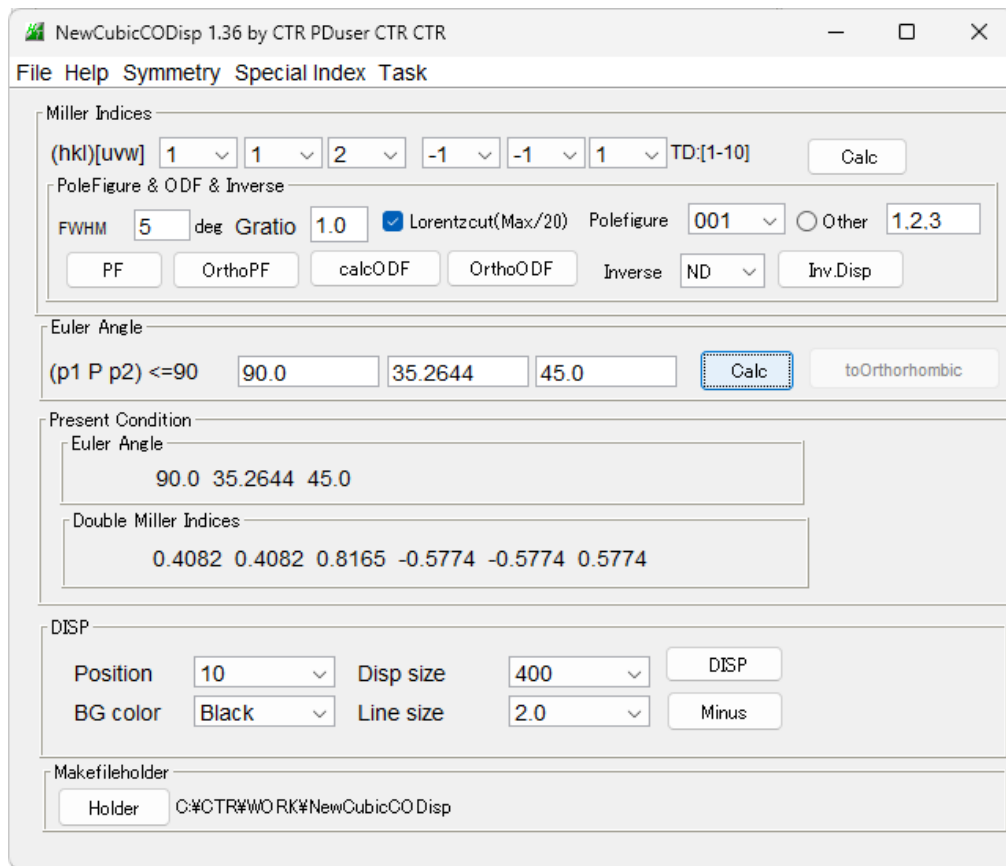


179.904 44.9611 180.075 から (0 1 1) [1 0 0] が計算される。



144.73 44.9754 179.921 から (0 1 1) [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。

## 7. Volume Fraction 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 (112) [-1-11] が計算される。←

各方位の Volume Fraction を求める。

```
>> cube= orientation.byMiller([0 0 1],[1 0 0],CS,SS)
```

```
>> volume(odf,cube,15*degree)
```

```
progress: 100%
```

```
ans = 0.2197
```

```
>> goss= orientation.byMiller([0 1 1],[1 0 0],CS,SS)
```

```
>>volume(odf,goss,15*degree)
```

```
progress: 100%
```

```
ans = 0.2492
```

```
>> brass= orientation.byMiller([0 1 1],[2 -1 -1],CS,SS)
```

```
>> volume(odf,brass,15*degree)
```

```
progress: 100%
```

```
ans = 0.2259
```

```
>> copper= orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS,SS)
```

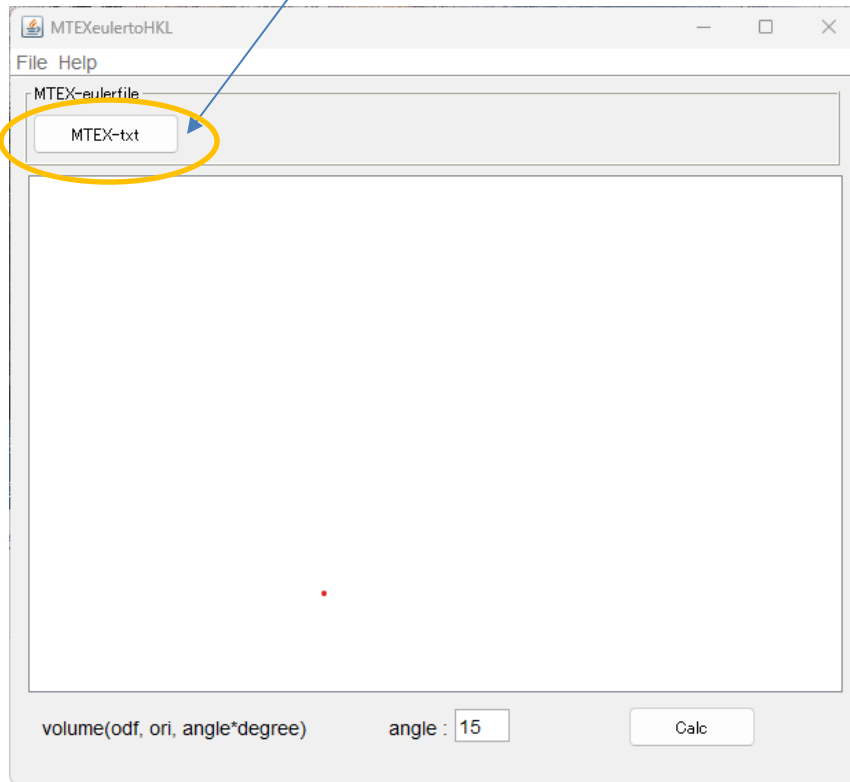
```
>> volume(odf,copper,15*degree)
```

```
progress: 100%
```

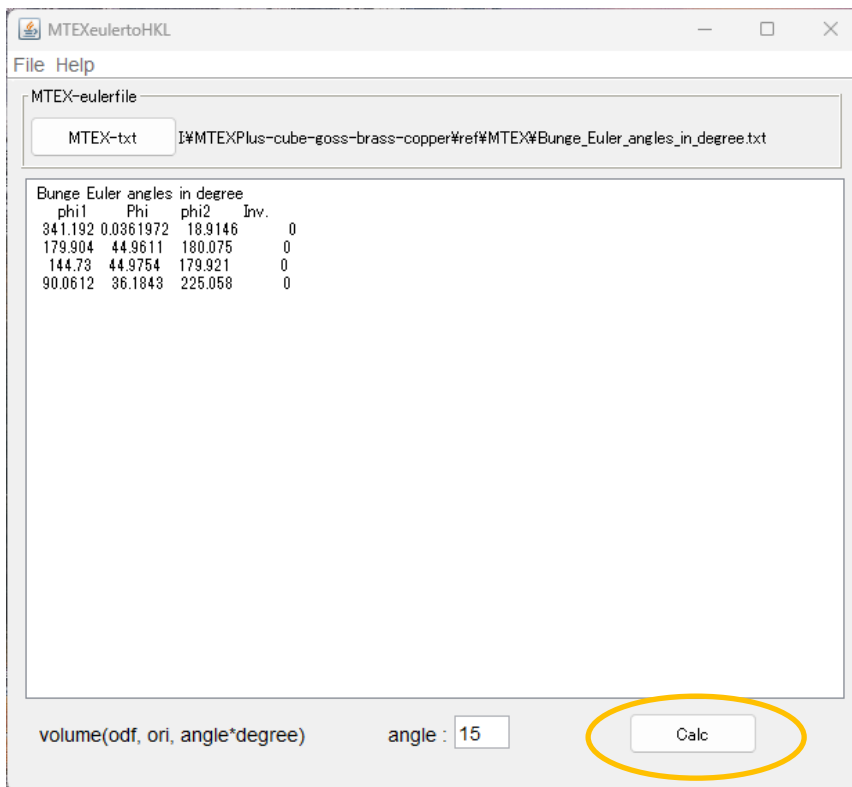
```
ans = 0.1992
```

この作業は煩わしいので次のソフトウェアを作成しました。

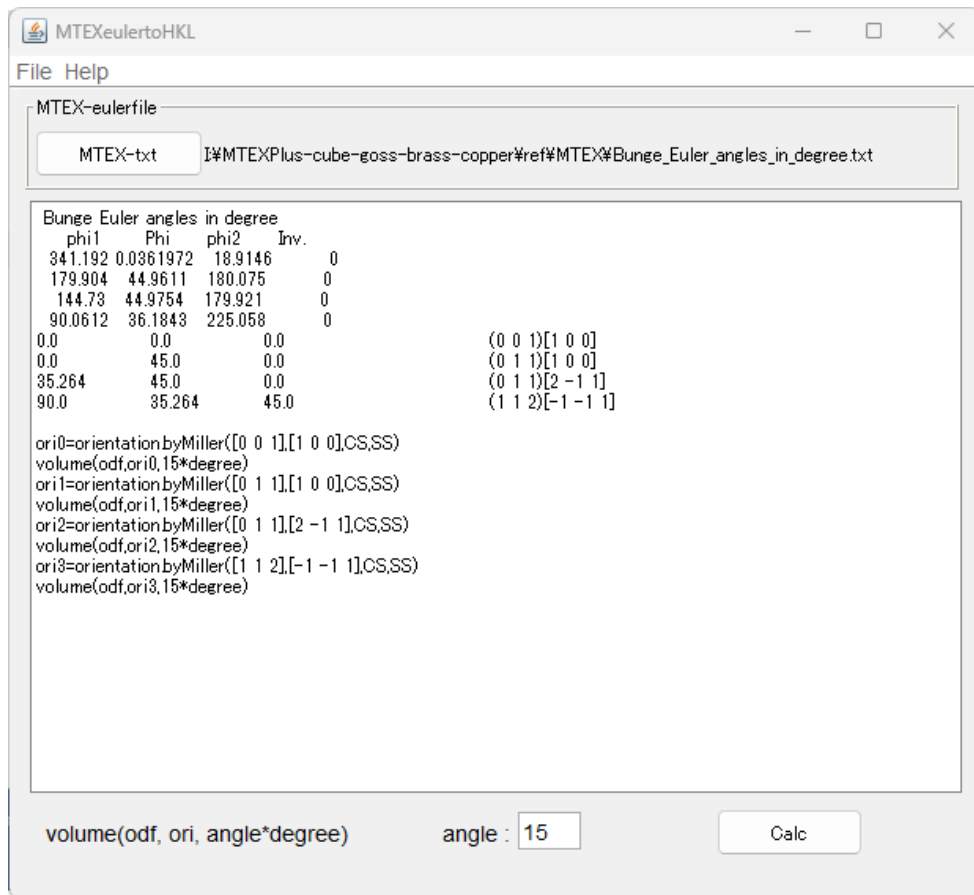
8. euler角度からMTEXのコマンドを作成する。  
6項でeuler角度のファイルを作成してある。  
このファイルからVolumeFraction用コマンドを作成する  
8. 1 入力



## 8. 2 計算を行う

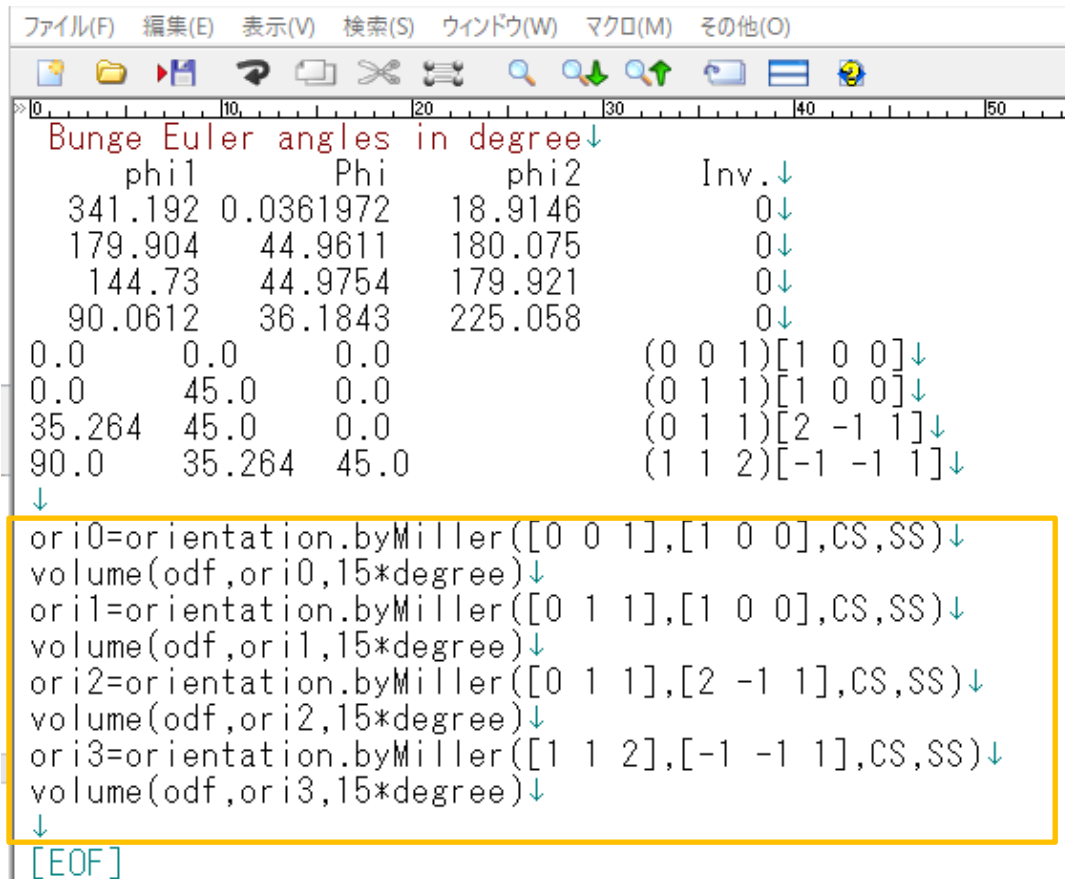


### 8. 3 計算結果



計算と同時に結果ファイル ( r e s u l t . t x t ) が作成されています。

### 8. 4 エディターで r e s u l t . t x t を読み込む



この部分を切り取りMTEXに張り付ける

## 8. 4 Volume Fraction 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

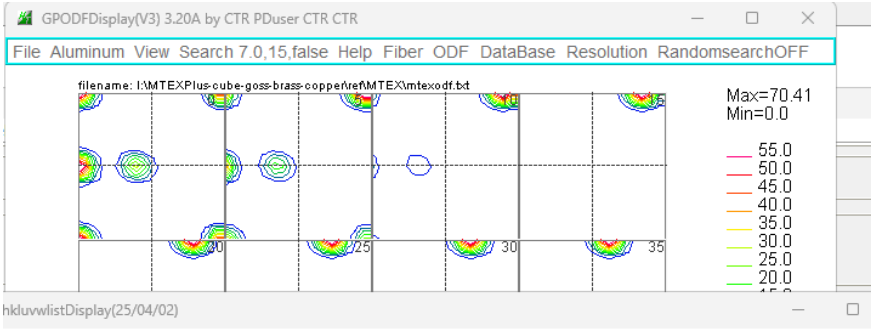
>>

同様の結果が得られます。

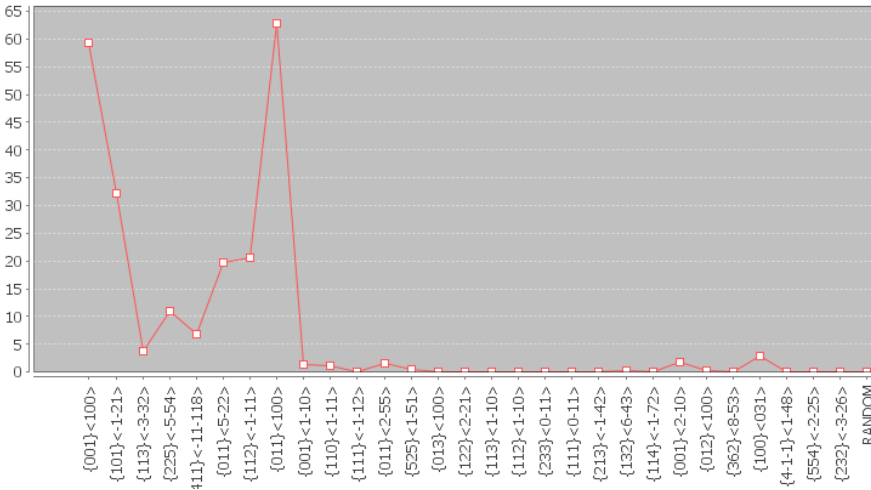
## 9. ODF 図から方位の決定

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,'mtxodf.txt')
```



I:\MTEXPlus-cube-goss-brass-copper\ref\MTEX\mtxAverage.csv



(cube : copper : S) = 4 : 2 : 1 を補正

random = 0%

