

MTEX付属EBSDデータをEBSD to ODFソフトウェアで処理

2021年01月23日

HelperTex Office

1. 概要
2. MTEX-5. 4. 0に添付されているデータ
3. angデータの場合
4. ctfファイルの場合
5. Brukerのtxtファイル
6. EBSDtoODFソフトウェアではtxtデータに以下の情報コメントでフォーマットを判断
7. symmetryや格子定数を含まない他のEBSDデータの場合 (titanium. txt)
 7. 1データを読み込む
 7. 2Symmetry情報をciから読み込む
 7. 3Symmetry情報をMaterialから読み込み
8. MTEXのEBSDデータ解析
 8. 1ODFの計算
 8. 2LaboTexと比較

1. 概要

MTEX-5.4.0にはEBSDデータが添付されている。
EBSDデータをMTEXで解析する場合、Symmetryと格子定数が必要である。
このSymmetryと格子定数部分に特色があるので、データ部分のフォーマットは推定できる。

Supported Data Formats

MTEX supports the following EBSD data formats:

.ang	EDAX ascii files.
.txt	Bruker ascii files.
.crc	Oxford binary files.
.csv	Oxford single orientation files.
.ctf	HKL single orientation files.
.txt	Dream 3d single orientation files.
.DRex	single orientation files.
.h5, .hdf5	Bruker, EDAX, Dream 3d binary files.
.osc	EDAX binary files.
.csv	Oxford ascii files.
.txt	ASCII files with Euler angles as columns.

しかし、Brukerのtxtデータを含むtxtデータでは、自動的に読み込まず

EBSD Generic Interface

Select Data Format を介してデータ読み込みが行われる。

しかし、毎回データ位置指定は煩わしい。

この手助けをEBSD to ODF ソフトウェアで行います。

2. M T E X – 5. 4. 0 に添付されているデータ

3dData	2021/01/19 20:57	ファイル フォルダー	
ACOM.ang	2021/01/19 20:57	ANG ファイル	17 KB
copper.osc	2021/01/19 20:57	OSC ファイル	6,306 KB
CSL.txt	2021/01/19 20:57	テキスト文書	6,871 KB
DRex.txt	2021/01/19 20:57	テキスト文書	107 KB
EDXLMdT64.cpr	2021/01/19 20:57	CPR ファイル	2 KB
EDXLMdT64.crc	2021/01/19 20:57	CRC ファイル	4,800 KB
Emsland_plessite_500x_15.ctf	2021/01/19 20:57	CTF ファイル	17,093 KB
Forsterite.ctf	2021/01/19 20:57	CTF ファイル	13,600 KB
martensite.crc	2021/01/19 20:57	CRC ファイル	8,389 KB
olivineopticalmap.ang	2021/01/19 20:57	ANG ファイル	6,361 KB
polycrystalline_aluminum.txt	2021/01/19 20:57	テキスト文書	433 KB
sharp.txt	2021/01/19 20:57	テキスト文書	945 KB
testdata_generator.py	2021/01/19 20:57	PY ファイル	3 KB
testdata_hex.ctf	2021/01/19 20:57	CTF ファイル	45 KB
testdata_sqr.ctf	2021/01/19 20:57	CTF ファイル	45 KB
titanium.txt	2021/01/19 20:57	テキスト文書	855 KB
85_829grad_07_09_06.txt	2021/01/19 20:57	テキスト文書	3,828 KB
data.ctf	2021/01/19 20:57	CTF ファイル	2,702 KB
DC06_2uniax.ang	2021/01/19 20:57	ANG ファイル	805 KB
eclogite.ctf	2021/01/19 20:57	CTF ファイル	35 KB
ferrite.ang	2021/01/19 20:57	ANG ファイル	5,485 KB
martensite.cpr	2021/01/19 20:57	CPR ファイル	2 KB
P5629U1.txt	2021/01/19 20:57	テキスト文書	708 KB
single_grain_aluminum.txt	2021/01/19 20:57	テキスト文書	1,614 KB
twins.ctf	2021/01/19 20:57	CTF ファイル	1,287 KB

EBSD Generic Interface

Select Data Format

Please specify the data type of each column! Use the values from the pop up list if possible!

Show Header

	Phase	X	Y	Euler1	Euler2
1	Phase	X	Y	phi1	Phi

< >

Angle Convention

Bunge (phi1 Phi phi2) ZXZ

Degree

Active Rotation

3. a n g データの場合
変換するデータを選択

EBSDtoODF 1.01T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile

C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\olivineopticalmap.ang

MaterialData

Material

cif

.TXT .cif file

Group

P1

Symmetry(OIM)

42

HKLCode

5

LaboTex

Aaxis

5.24

Baxis

5.24

Caxis

10.3

alpha

90.0

beta

90.0

gamma

90.0

183:	1.64198	2.64795	1.39764	12.00000	0.00000	184750.5	0.263	1	0	1.169	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
184:	1.64511	2.64658	1.40167	16.00000	0.00000	190592.6	0.425	1	0	0.975	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
185:	1.65003	2.65055	1.40223	20.00000	0.00000	175735.8	0.281	1	0	1.139	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
186:	1.64906	2.64736	1.40763	24.00000	0.00000	164054.9	0.282	1	0	1.315	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
187:	1.64619	2.64662	1.40882	28.00000	0.00000	170213.3	0.420	1	0	0.831	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
188:	1.65036	2.64843	1.41355	32.00000	0.00000	173071.2	0.360	1	0	1.168	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
189:	1.64426	2.65091	1.40409	36.00000	0.00000	105087.5	0.205	1	0	1.580	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
190:	6.01848	0.47948	0.86507	40.00000	0.00000	53562.4	0.001	3	0	2.242	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
191:	1.02674	1.55019	5.37942	44.00000	0.00000	43186.9	0.025	1	0	2.359	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
192:	1.76871	1.76511	4.64990	48.00000	0.00000	42109.0	0.007	1	0	2.419	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
193:	6.27863	1.34746	1.31240	52.00000	0.00000	35992.3	0.000	1	0	2.285	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
194:	4.36202	1.44591	5.43568	56.00000	0.00000	76183.5	0.060	1	0	1.737	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
195:	4.36117	1.44460	5.43966	60.00000	0.00000	153203.4	0.533	1	0	1.062	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
196:	4.35841	1.44285	5.44178	64.00000	0.00000	200322.3	0.315	1	0	1.106	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
197:	4.35997	1.44273	5.44119	68.00000	0.00000	214971.7	0.466	1	0	1.142	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
198:	4.36095	1.44459	5.43964	72.00000	0.00000	202979.6	0.463	1	0	1.102	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
199:	4.36150	1.44219	5.43721	76.00000	0.00000	159648.7	0.614	1	0	1.193	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
200:	4.43858	0.84443	4.99301	80.00000	0.00000	71151.6	0.001	1	0	2.223	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

Makefile

DataStartline

180

PhasePotision

8

Selectphase

1

f1

1

F

2

f2

3

X

4

Y

5

OIM-Ang

Holder

C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\olivineopticalmapEtoO.ang

Filemake

M T E Xでc t fで読み込む場合、H K L－c t fを選択、(複数相同時が可能)

Chalcopyrite

Chalcopyrite

Enstatite

Dolomite

olivine

AllPhase

T e x T o o l sの場合、O I M－a n gを選択 (単一相を選択)
L a b o T e xの場合、L a b o T e x－S O Rを選択 (単一相を選択)

4. c t f ファイルの場合

EBSDtoODF 1.01T[21/03/31] by CTR

File

Help

InputData

InputFile

C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\data.ctf

MaterialData

Material

cif

.TXT .cif file

Group

P1

Symmetry(OIM)

2

HKLCODE

2

LaboText

Aaxis

9.541

Baxis

17.74

Caxis

5.295

alpha

90.0

beta

103.67

gamma

90.0

184 :	0	1650.0	0.0000	0	3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	113	147
185 :	0	1660.0	0.0000	0	3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	111	167
186 :	1	1670.0	0.0000	7	0	96.800	112.14	27.302	0.3657	122	171
187 :	1	1680.0	0.0000	7	0	97.128	112.51	28.129	0.4617	107	151
188 :	0	1690.0	0.0000	0	3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	66	111
189 :	2	1700.0	0.0000	7	0	137.39	116.14	67.189	0.8597	107	155
190 :	2	1710.0	0.0000	7	0	138.14	116.21	68.021	1.1475	92	146
191 :	2	1720.0	0.0000	7	0	169.95	70.283	250.83	0.8908	113	133
192 :	2	1730.0	0.0000	7	0	169.79	70.718	251.42	0.6411	137	164
193 :	2	1740.0	0.0000	7	0	169.70	70.336	251.40	0.7982	145	163
194 :	2	1750.0	0.0000	7	0	170.40	70.414	251.29	1.1511	142	179
195 :	0	1760.0	0.0000	0	3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	143	172
196 :	2	1770.0	0.0000	7	0	169.95	70.053	251.06	0.7891	130	178
197 :	2	1780.0	0.0000	7	0	171.10	69.914	250.52	0.5957	124	166
198 :	0	1790.0	0.0000	0	3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	138	173
199 :	0	1800.0	0.0000	0	3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	135	181
200 :	2	1810.0	0.0000	7	0	170.70	69.275	250.54	0.7872	148	196

Makefile

DataStartline

19

PhasePotision

1

Selectphase

1

f1

6

F

7

f2

8

X

2

Y

3

OIM-Ang

Holder

C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\dataEtoO.ang

Filemake

a n g データと同一に扱えます。

5. Brukerのtxtファイル

EBSD Generic Interface

Bruker社データは Select Data Format の選択のため、EBSDtoODF ソフトウェアで (ang, cif, SOR) ファイルに変更してMTEX, TexTools, LaboTexに取り込む TXTデータの特徴

```
#Phase0:↓
# Name: Aluminum↓
# Spacegroup: F m#ovl3m↓
# A: 4.041↓
# B: 4.041↓
# C: 4.041↓
# Alpha: 9E1↓
# Beta: 9E1↓
# Gamma: 9E1↓
```

Bruker.txtデータ読み込み（複数相含まれている場合、最初の相を表示）

EBSDtoODF 1.01T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile: C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\Bruker.txt

Material: Aluminum

MaterialData

Material: cif

Group: Fm3c

Symmetry(OIM): 43

HKLCODE: 11

LaboTexCode: 7 - O (cubic)

Axis: 4.041

Basis: 4.041

Caxis: 4.041

alpha: 90.0

beta: 90.0

gamma: 90.0

#Orientations:	#Index	Phase	x(Px)	y(Px)	x(μm)	y(μm)	phi1	PHI	phi2	Bands	BC	GrainIndex
37:	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100	-1
38:	1	1	1	0	-1.467608805E-1	0	3.027579964E2	3.653832585E1	9.45015566			
53:	14	0	14	0	-2.054652327	0	0	0	0	0	0	93
54:	15	0	15	0	-2.201413208	0	0	0	0	0	0	102

Makefile

DataStartline: 39

PhasePotision: 2

Selectphase: 1

f1: 7

F: 8

f2: 9

X: 3

Y: 4

OIM-Ang

Holder: C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\BrukerEtoO.ang

Filemake

各種フォーマットに変換できます。

複数相の場合、すべて一括変換と、LaboTexはTexTools用に単一相選択の可能

6. EBSD to ODF ソフトウェアでは t x t データに以下の情報コメントでフォーマットを判断

Bruker-TXT

S y m m e t r y と格子定数が含まれているので自動変換が可能

```
;"#Index Phase x(Px) y(Px) x(μm) y(μm) phi1 PHI phi2 Bands BC GrainIndex";|
```

Oxford

S y m m e t r y と格子定数が含まれていなかった為、c i f などから取り込み

```
"Index,Phase,Xpos,Ypos,Euler1(-),Euler2(-),Euler3(-),MAD(-),AFI,BC,BS,Status";
```

メーカー不明データ

S y m m e t r y と格子定数が含まれていなかった為、c i f などから取り込み

```
"ポイント,x,y,Crystal ID,h,k,l,u,v,w,Phi1,Phi2,Phi,パターン クオリティ,誤差角度";
```

メーカー不明データ

S y m m e t r y と格子定数が含まれていなかった為、c i f などから取り込み

```
"Index Phase X Y Euler1 Euler2 Euler3 MAD BC BS Bands Error ReliabilityIndex";
```

メーカー不明データ

S y m m e t r y と格子定数が含まれていなかった為、c i f などから取り込み

```
=" phi1 Phi phi2 phase ci iq sem_signal x y grainId";
```

メーカー不明データ

S y m m e t r y と格子定数が含まれていなかった為、c i f などから取り込み

```
:"Phase x y Euler1 Euler2 Euler3";
```

メーカー不明データ

S y m m e t r y と格子定数が含まれていなかった為、c i f などから取り込み

```
C7=" phi1 Phi phi2 phase x y";
```


7. symmetryや格子定数を含まない他のEBSDデータの場合 (titanium. txt)

データ

	phi1	Phi	phi2	phase	ci	iq	sem_signal	x	y	grainId↓
1	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↓	
298.433	155.486	301.614	0	0.505	3304.9	16712	96	0	7↓	
281.615	147.97	306.664	0	0.705	2687.6	18552	108	0	12↓	
101.667	31.8822	113.202	0	0.664	2883.7	17457	120	0	12↓	
281.73	147.869	306.537	0	0.427	3026.4	17895	132	0	12↓	
109.473	36.6802	64.2372	0	0.455	2525.4	17837	144	0	8↓	
109.77	36.9535	63.7118	0	0.609	3107.1	18330	156	0	8↓	

7. 1 データを読み込む

EBSDtoODF 1.01T[21/03/31] by CTR

File Help

InputData

InputFile

C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\titanium.txt

Phase0

Phase0

AllPhase

MaterialData

Material

cif

.TXT .cif file

Group

P1

Symmetry(OIM)

1

HKLCode

1

LaboTexCode

1 - C1 (triclinic)

Aaxis

1

Baxis

1

Caxis

1

alpha

90

beta

90

gamma

90

1:	phi1	Phi	phi2	phase	ci	iq	sem_signal	x	y	grainId
2:	227	3.99925	343.998	0	0.391	3169.6	1	0	0	1
3:	298.932	155.674	301.718	0	0.7	3173.6	17605	12	0	7
4:	298.03	155.571	301.047	0	0.614	3147.5	17328	24	0	7
5:	298.509	155.642	301.608	0	0.823	3305.9	17295	36	0	7
6:	298.956	155.845	302.095	0	0.527	2912.5	19095	48	0	7
7:	298.354	155.753	301.087	0	0.632	2976.8	17766	60	0	7
8:	298.702	155.547	301.802	0	0.791	3143.4	18189	72	0	7
9:	298.793	155.811	301.425	0	0.882	3411.8	18203	84	0	7
10:	298.433	155.486	301.614	0	0.505	3304.9	16712	96	0	7
11:	281.615	147.97	306.664	0	0.705	2687.6	18552	108	0	12
12:	101.667	31.8822	113.202	0	0.664	2883.7	17457	120	0	12
13:	281.73	147.869	306.537	0	0.427	3026.4	17895	132	0	12
14:	109.473	36.6802	64.2372	0	0.455	2525.4	17837	144	0	8
15:	109.77	36.9535	63.7118	0	0.609	3107.1	18330	156	0	8
16:	110.016	36.8779	63.5227	0	0.773	3227.6	18165	168	0	8
17:	109.318	36.7976	64.3191	0	0.314	3272	19169	180	0	8
18:	109.564	36.7816	304.079	0	0.709	2832.2	17923	192	0	8
19:	289.466	143.117	295.946	0	0.218	3067.9	18963	204	0	8

Makefile

DataStartline

2

PhasePotision

4

Selectphase

0

f1

1

F

2

f2

3

X

8

Y

9

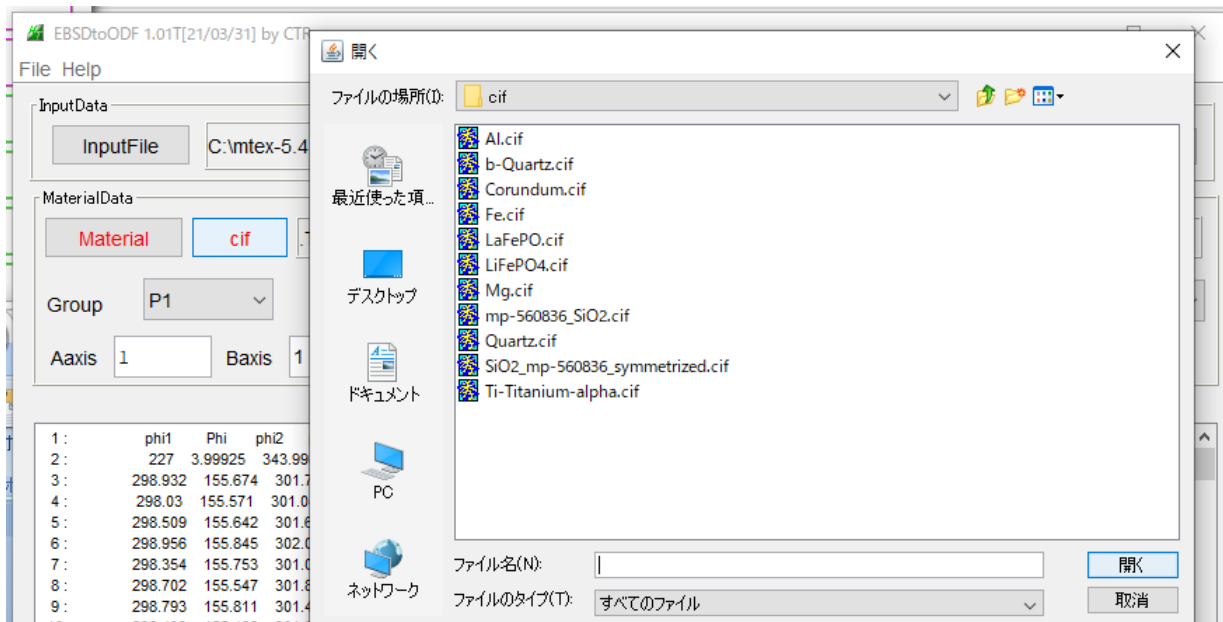
OIM-Ang

Holder

C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\titaniumEtoO.ang

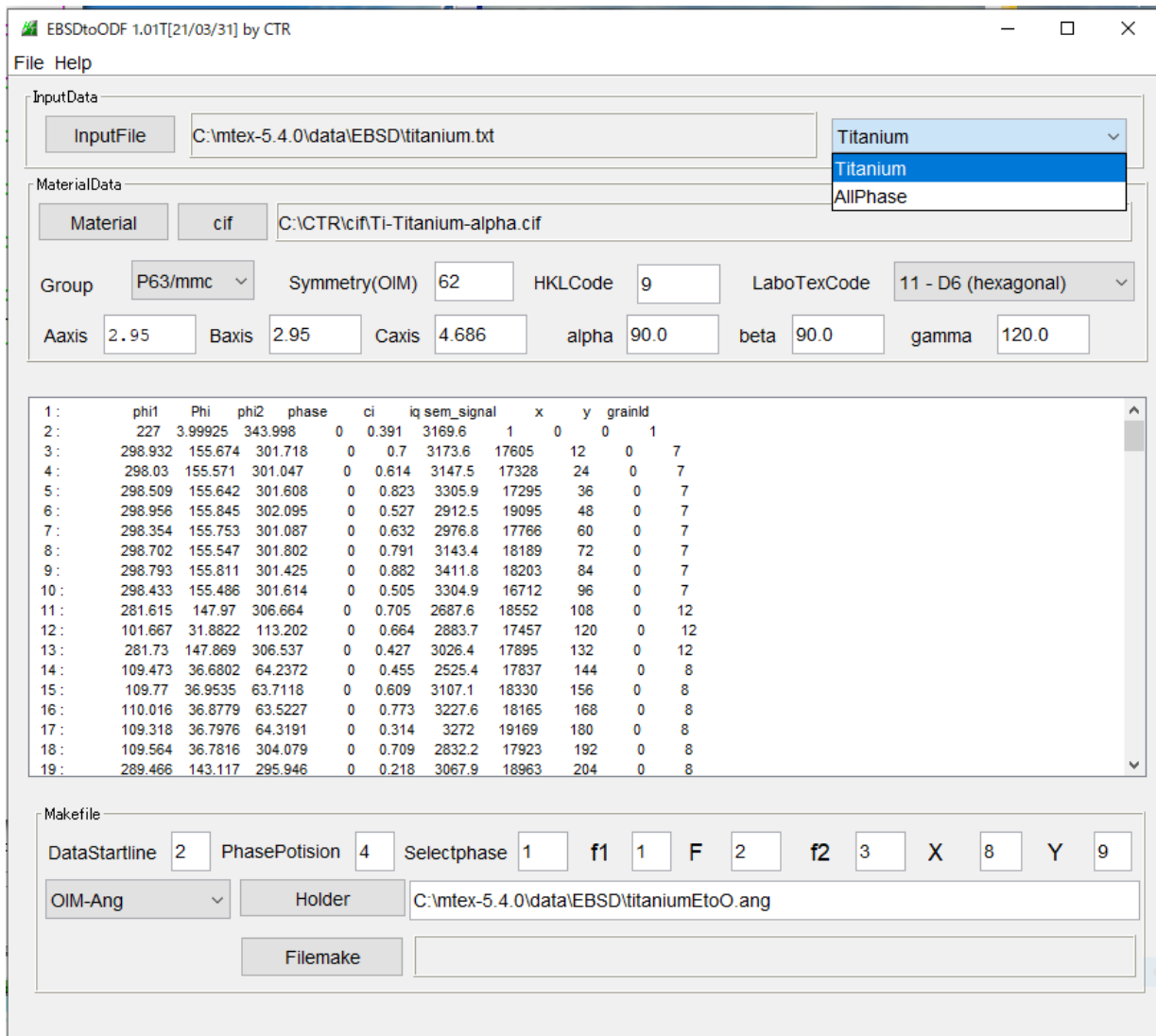
Filemake

7. 2 Symmetry情報をc i から読み込む



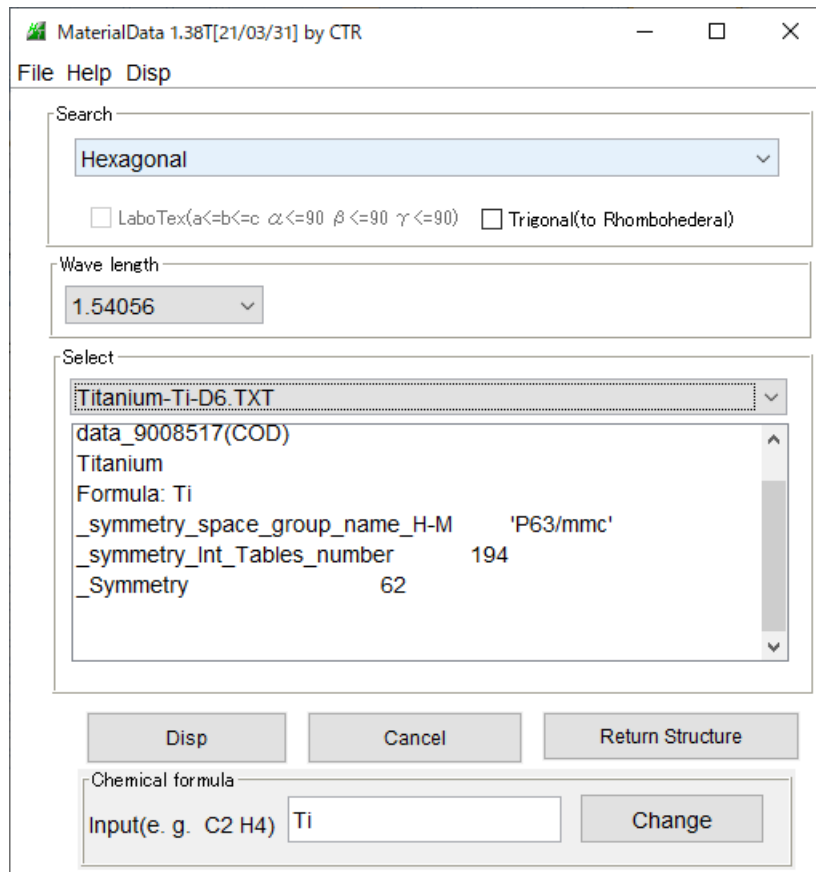
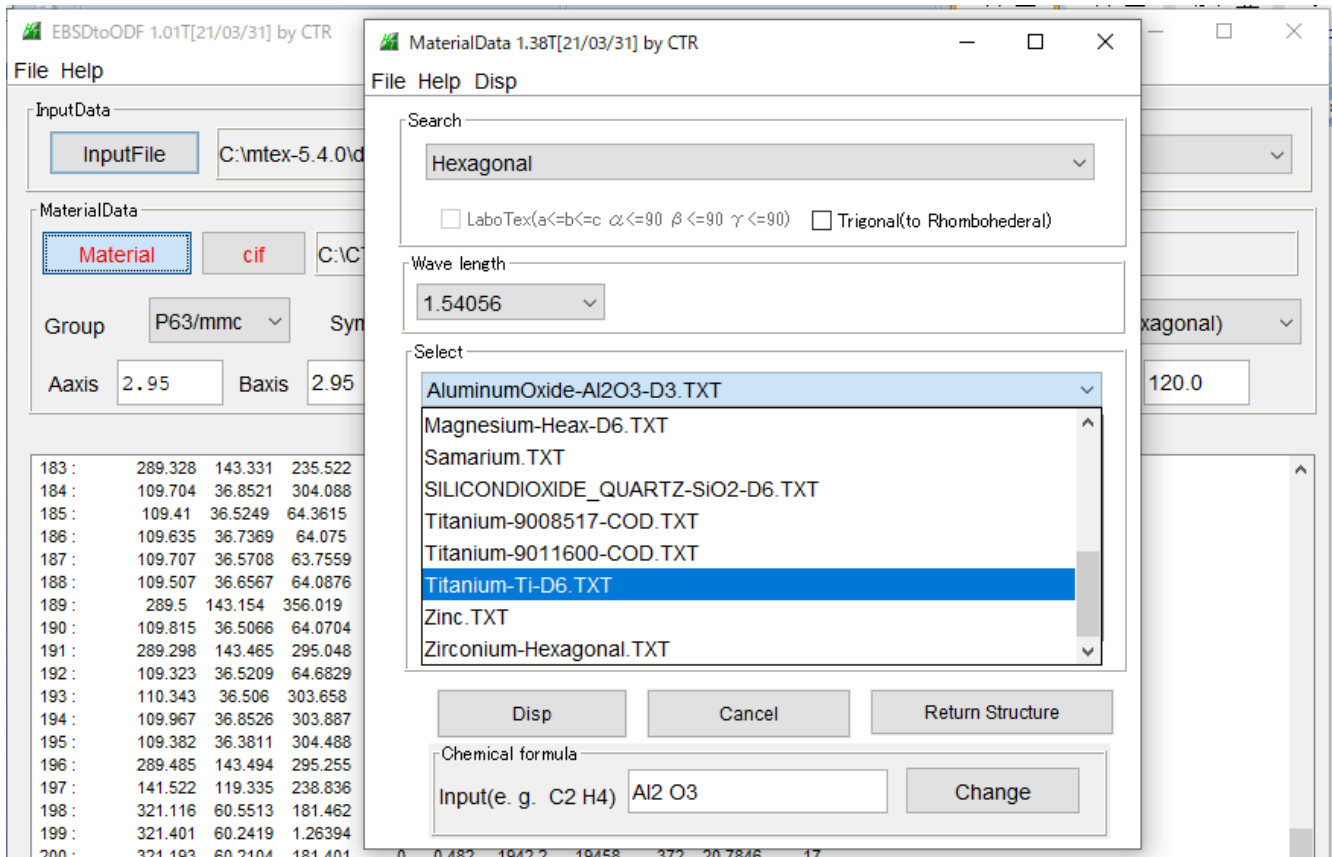
c i fからt i t a n i u mのs y m m e t r yと格子定数が読み込まれる

複数相の場合、P h a s e毎に繰り返す



7. 3 Symmetry情報をMaterialから読み込み

Symmetryがサポートされているデータを読み込む



8. MTEXのEBSDデータ解析

Import_wizard

Import Wizard

Import EBSD

Select Data Files

Pole FiguresFRSDPDFTensor

titaniumEto0.ctf

+

-

Plot

<< Previous

Next >>

Finish

Crystal Reference Frame for Phase 0

Crystal Symmetry

Mineral

Indexed

Not Indexed

mineral nameTitanium-Ti-D6Load Cif File

plotting color

Crystal Coordinate System

Point Group6/mmmX||a*Y||b

Axis Lengtha2.95b2.95c4.686

Axis Anglealpha90beta90gamma120

Plot

<< Previous

Next >>

Finish

Specimen Reference Frame

Specimen Symmetry

Specimen Coordinate System

rotate data by Euler angles (Bunge) in degree000

apply rotation to Euler angles and spatial coordinates

apply rotation only to Euler angles

apply rotation only to spatial coordinates

use CTF interface flag 'convertSpatial2EulerReferenceFrame'

use CTF interface flag 'convertEuler2SpatialReferenceFrame'

MTEX Plotting Convention

Y

Z

X

Y

Z

X

X

Z

Y

Z

X

Y

X

Y

Z

Y

X

Z

Z

Y

X

X

Z

Y

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

Plot

<< Previous

Next >>

Finish

Import Data

Select Method

Summary of EBSD data to be imported:

phase -1 (not Indexed): notIndexed, 0 orientations
phase 0 (Titanium-Ti-D6): symmetry 6/mmm, 8100 orientations

Import to

script (m-file)

workspace variable

Plot

<< Previous

Next >>

Finish

を行う。

```
% crystal symmetry
CS = {...
    'notIndexed',...
    crystalSymmetry('6/mmm', [3 3 4.7], 'X||a*', 'Y||b', 'Z||c*', 'mineral', 'Titanium-Ti-D6', 'color', [0.53 0.81 0.98]));

% plotting convention
setMTEXpref('xAxisDirection','north');
setMTEXpref('zAxisDirection','outOfPlane');
```

8. 1 ODF の計算

```
odf=calcDensity(ebsd( 'Titanium-Ti-D6').orientations,'halfwidth',2*degree)
```

```
>> odf=calcDensity(ebsd( 'Titanium-Ti-D6').orientations,'halfwidth',2*degree)
```

```
odf = ODF (show methods, plot)
```

```
crystal symmetry : Titanium-Ti-D6 (6/mmm, X||a*, Y||b, Z||c*)
```

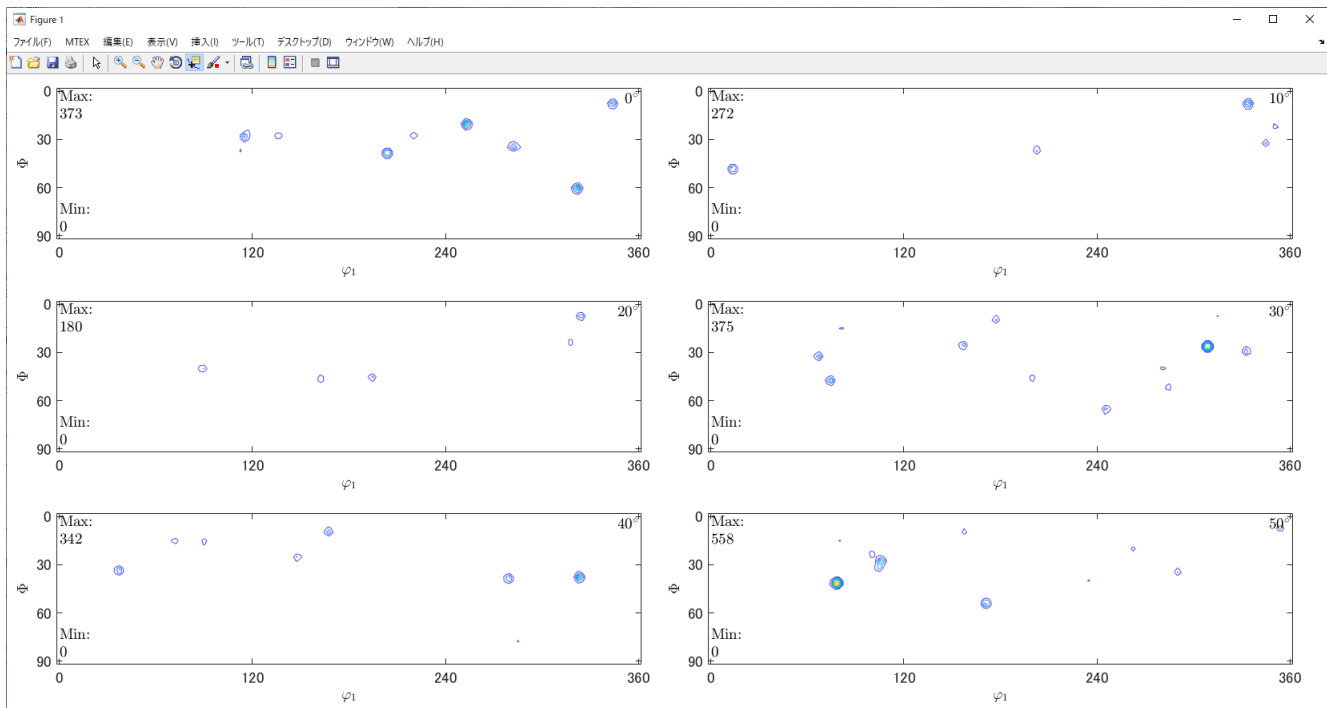
```
Radially symmetric portion:
```

```
kernel: de la Vallée Poussin, halfwidth 2°
```

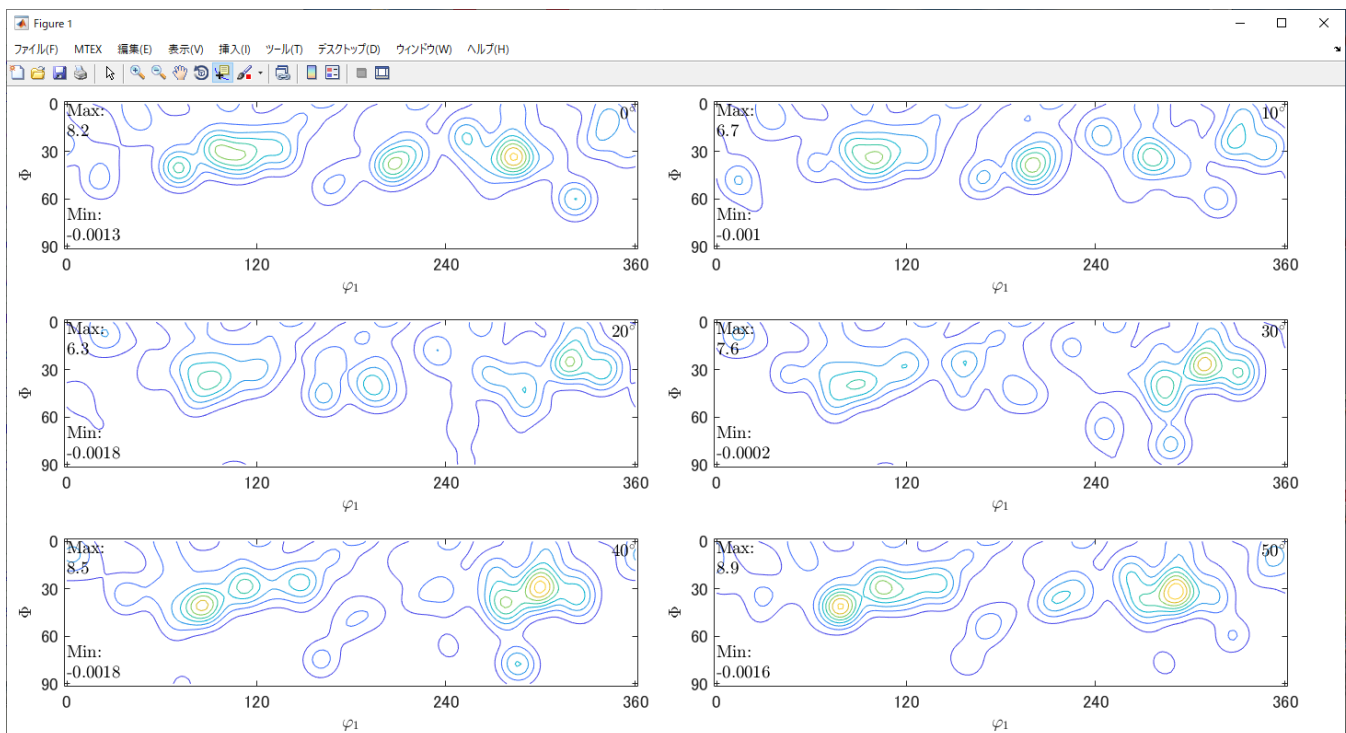
```
center: 809 orientations, resolution: 1°
```

```
weight: 1
```

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



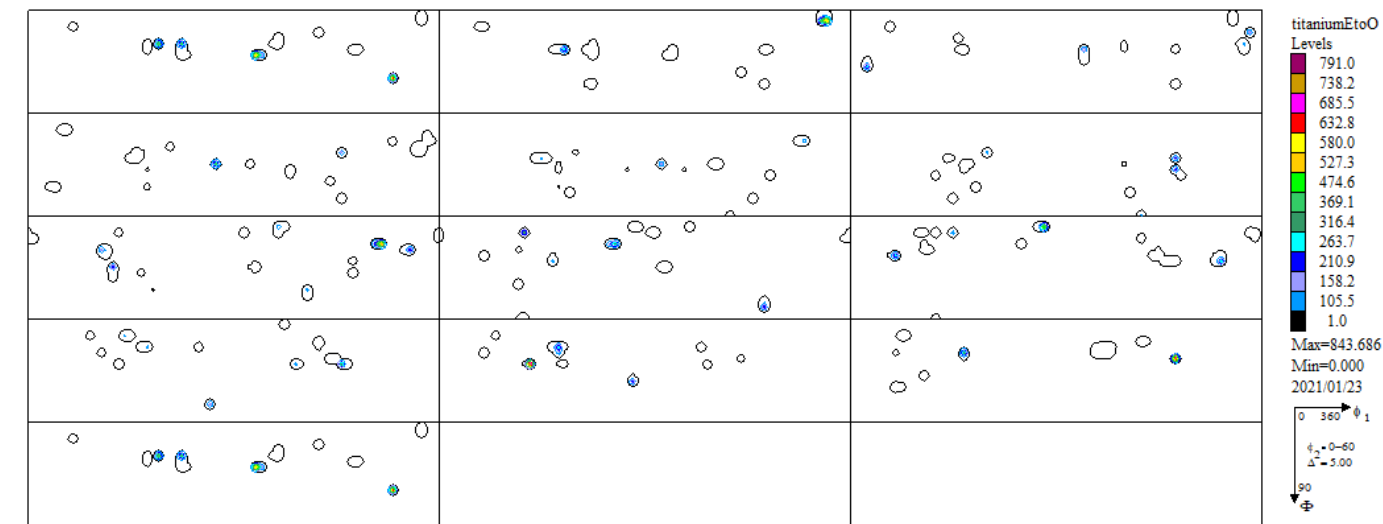
```
odf2=calcDensity(ebsd( 'Titanium-Ti-D6').orientations)
```



XRDODF解析で用いられているODF図を表示するなら、halfwidth=2degreeが正しい

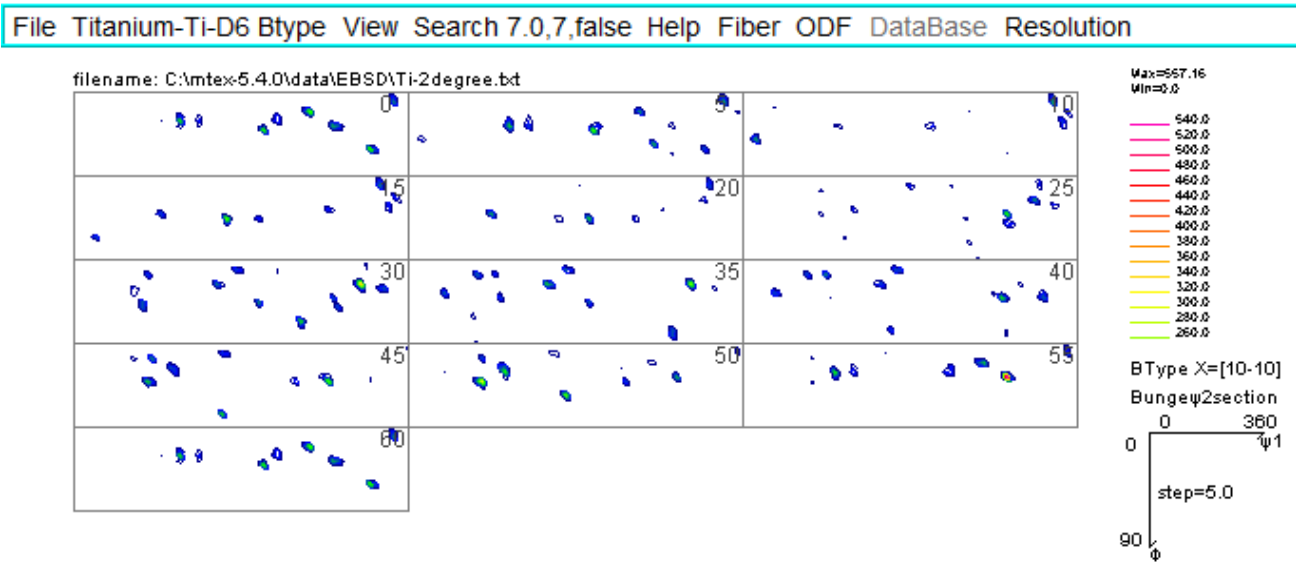
8. 2 L a b o T e x と比較

L a b o T e x



ODF を E x p o r t し、C T R で比較

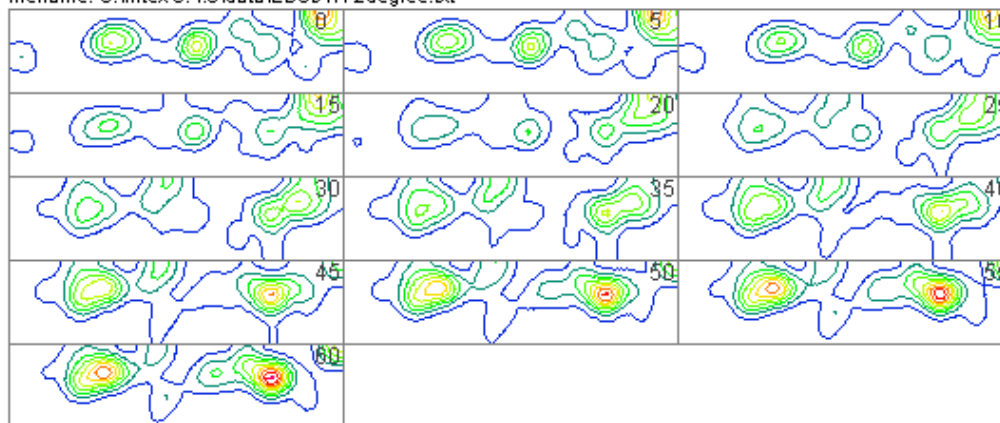
Halfwidth=2degree



Halfwidth=2degree を平滑化で、MT E Xの halfwidth=10deg の密度に合わせる

File Titanium-Ti-D6 Btype View **SM=20(1)** Search 7.0,7,false Help Fiber ODF DataBase Resolution

filename: C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\Ti-2degree.bt



Max=557.16
SM=9.19

9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0

BType X=[10-10]

Bungeψ2section

0 360

ψ1

step=5.0

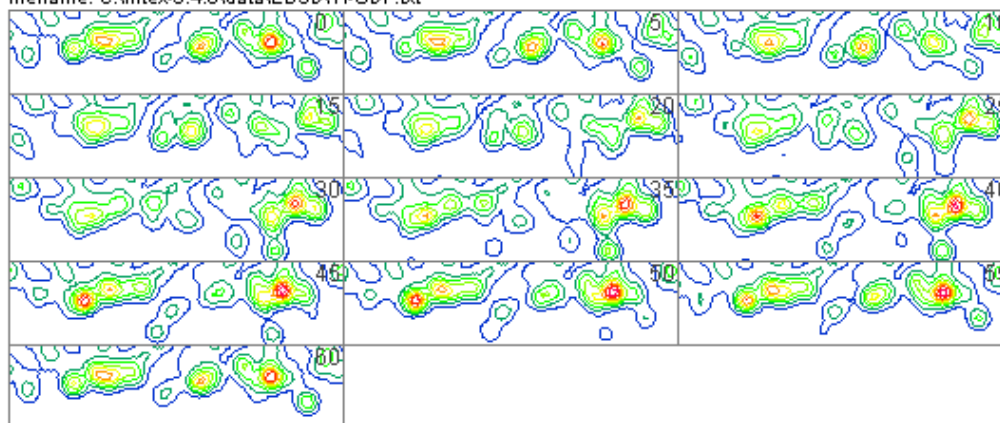
90

0

Halfwidth=10degree

File Titanium-Ti-D6 Btype View Search 7.0,7,false Help Fiber ODF DataBase Resolution

filename: C:\mtex-5.4.0\data\EBSD\Ti-ODF.bt



Max=8.85
Min=0.0

8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0

BType X=[10-10]

Bungeψ2section

0 360

ψ1

step=5.0

90

0