# Mg合金のMTEX解析

Ti, Mgで見られる極点図 測定データ解析(バックグランド、吸収、defocus) MTEX入力データの作成 ODF解析 ODF図、極点図、逆極点図のExport 入力極点図と再計算極点図から入力データ評価 ODF図の解析 逆極点図の解析 極点図の解析 参考資料

> 2019年03月07日 HelperTex Office 山田 義行

# Mg合金をMTEXで解析



バックグランド



All background



# Defocus

XRDで極点測定を行うと、 defocusにより回折線が広がり、極点図の外周向け強度が低下する



有限な受光スリット幅から回折ピークからはみ出る->強度低下

この補正に無配向試料で補正する。

# Defocus補正(defocusTABLE)作成

₩ {0,0,2} 1006.7 - □ ×	₩ {1,0,0} 1004 □ ×	₩ {1,0,1} 1008 □ ×	₩ {1,0,2} 1015.8 - □ ×					
			RD (10.2)					
<u>M</u>	ODFP	bleFigure2 3.82SKT[19/03/31] by (	CTR	- 🗆 🗙				
File Linear(absolute)Contour ToolKi	t Help InitSet BGMode Measure Cond	ition Free OverlapRevision MinimumMe	ode Rp% Normalization					
ASC(RINT-PC)	002_15-90-defocus.asc 100_15-90-defocus.asc 10	01_15-90-defocus.asc 102-15-90-defocus.asc						
Calcration Condition								
Previous Next C:#CTR#DA	TA¥Mg-TD-split¥15-90¥002_15-90-defocus.asc			hkl 0,0,2 Change				
Backgroud delete mode ✓ DoubleMode SingleMode U Minimum(α β) Minimu Peak slit 7,0 mm BG Slit 7,0 mm AbsGab □ Ref □ Trans Schulz reflection mt	Backgroud delete made       Smoothing       Smoothing       Smoothing         O DoubleMode       SingleMode       LowMode       HighMode       Nothing       BG defocus       DSH12mm*Schulz+RSH5mm       Minimum mo         Minimum(α β)       MinimumAverage(α)X       0.5       Trans blinds angle       30.0         Peak slit 7.0       mm       PeakSlit / BGS_BG Scope       80.0       deg.       90.0       deg.       Set       Disp       Minimum         Absorbic       Ref       Trans       Schulz reflection method       V       Change       Absorption coefficien       300.0       1/cm       Thickness       0.1       Cm       Set       2Theta       34.4       deg.       0 1/kt       Profile							
O Defocus(1) functions file     Make defocus function files by	Files V Normalizat	ion 😰		TextDisp				
Defocus(3) function files folder(C     Oefocus(2) function files folder(C	alc unbackdefocus) BB185mm alc backdefocus) DSH12mm+Schulz+F	Limit Alfa Defocus value	Free(LimitValue=0.0) v Angle Rp%(Cubic only)	1/Ra Profile				
Smoothing for ADC	✓ Disp Vormalization ✓ CTR Co	nnect CenterData OutFiles	Asc O Ras O TXT   TXT TXT2	Cancel Calc Connect EntRODF ODF ValueODFVF_ ValueODFVF-A				
バックグラン	ド削除し、Ca	alcでTXT2フ	ー アイル作成					

TXT2を選択し、TABLE作成する。

# 内部defocusTABLEで補正

	## {0,0,2} 1888        ×       ## {1,0,1} 2916        ×         RD       (0,0,2)       RD       (1,0,1)         TD       (1,0,1)       (1,0,1)       (1,0,1)
	ODFPoleFigure 2 3.82SKT[19/03/31] by CTR     ODFPoleFigure 2 3.82SKT[19/03/31] by CTR
	File select
	ASC(RINT-PC) V 2002_15-90-rp_2ASC 101_15-90-rp_2ASC 102-15-90-rp_2ASC
	Previous Next C#CTR#DATA#Me=TD-split#15-90#REVERSE#002_15-90=rp_2ASC
	Backgröhd delete mode DoubleMode O SingleMode O LowMode O HighMode O Nothing BG defocus DSH12mm+Schulz+FSH5mm Minimum mo
	Minimum(α β) O MinimumAverage(α)X 0.5 Trans blinds angle 30.0
	Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm ⊻ PeakSlit / BGS_ BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp α Inhibit
	Ref Trans Schulz reflection method v Change Absorption coefficien 300.0 1/cm Thickness 0.1 cm v Set 2Theta 34.404 deg. (a) 1/kt Profile
(	CHARTER CONTINUES IN CHARTER CHAR
	Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus)     BB185mm     BB185mm     Imit Aria Defocus value     Free(LimitValue=0.0)     Free(LimitValue=0.0)     I/Ra     Profile
	Smoothing for ADC Cycles 2 Weight 10 Disp After connection Normal sation Center Data OutFiles OutFiles OutFiles OutFiles Cancel Calc Connect Exit@DF ODF ValueODFVF-A
▲ {0,0,2} 14.7 -	· · · × # {1,0,1} 2.57 - · × # {1,0,2} 3.08 - · ×
RD	

## MTEX入力データ作成

<u> </u>	PFtoODF3 8.41SKT[19/03/31] by CTR – 🗆 🗙						
File	Opt	tion Symmetric Software Data	Help				
		Outside text(Vector) CCW				Initialize	Start
		Outside CSV(Vector) CCW					
		Inside text CCW	iles)	11 - D6 (hexag	onal) 🗸 🗸	● getHKL<-	Filename
		*Labotex(EPF) CW	alpha 90.0	beta 90	.0 gamm 120.0	AllFile	Select
<u> </u> 	-	Stadard ODF CCW				<u> </u>	
		Siemens CCW	a,b,intens.))	h,k,l	2Theta Alpha scope	AlphaS AlphaE	Select
		TexTools(txt) CCW		0,0,2	34.404 0.0->75.0	0.0 75.0	
		*TexTools(pol) CCW		1,0,1	36.646 0.0->75.0	0.0 75.0	✓
		TexTools(pol) CW		1,0,2	47.844 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	
		StandaradODF2.5 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	
		Labotex(EPF) CCW		5,2,1	0.0	0.0 0.0	
		MTEX(ASC) CCW		5,3,1	0.0	0.0 0.0	
[	LaboTex(PPF) CW		TXT 101 15-90-r	τρ 2 chB00D2S 2	2.TXT 102-15-90-rp 2 chB0	0D2S 2.TXT	
<u> </u>	*LaboTex(PPF) ATEX CCW		Labotex(EPF),popLA(RAW) filename				
	Sy	mmetric type Full	verage	erage Asc file save TDsp			
					<u> </u>		

対称ODF図を得るために、1/4対称極点図とする

<b>24</b>	TextDisplay 1.13	3S C:¥CTR¥DATA¥Mg-TD-split¥1
File Hel	р	
*TYPE	= Raw	
*CLASS	= Polefig	
*SAMPL	E =	
*COMME	NT =	
*FNAME	=	
*DATE	=	
*GROUF	_COUNT	= 1
*THICKN	ESS = 0, 0.0	
*MU		= 0, 0.0
*MEAS_	NODE	<ul> <li>Continuous Scanning</li> </ul>
*SPEED	DIM = sec./step	
*YUNIT		= counts
*SEC_C	TAUC	= 16
*PF_ME	THOD	= 1, Schulz reflection method
*PF_PC	TAUC	= 1,16
*PF_AST	FART = 1,15.0	
*PF_AST	OP = 1,90.0	
*PF_AST	EP = 1,5.0	
*PF_2TH	IANGLE	= 1,47.844
*BEGIN		
*GROUF	= 0	
*START	= 0.0	
*STOP	= 360.0	
*STEP	= 5.0	
*SPEED	= 1.0	
*LOW	= 0	

#### Triclinic->Orthorombic

			PFto	DODF3	8.41SKT
	Symmetric S	oftwa	are Data	Help	
select >			Full		
aterial Mag		Half			
re Code(Symmetr			Quater	les)	11 -
	<=b 1.0		Fiber	alpha	90.0

# MTEX

MTEXはMatLab環境下で動作する無料のODF解析ソフトウエア インストールは、MTEX-start.pdfを参考にしてください。

MTEXの説明は、Mg-TD-Split、Triclinic->Orthorombicで説明します。 入力極点図は、BG削除、defocus補正したASCデータとします。



作業holder指定 作業holder指定	January       Martab R2017b         January       January         January       Martab R2017b         January       January         January       Martab R2017b         January       January         January       January
>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>	Import Wizard     Import Wizard     Crystal Reference Frame     Crystal Symmetry     Mineral   Import Wizard     Mineral     Import Wizard     Crystal Reference Frame   Crystal Symmetry     Mineral   Import Wizard     Load Cif File     plotting color     I i ght blue     Crystal Coordinate System     Point Group     8/mmm     X  a*
Plot << Previous Next >> Finish	Axis Length       a       3.20927       b       3.20927       c       5.21033         Axis Angle       alpha       90       beta       90       gamma       120         Plot

# MTEX(Mファイル作成し、データ読み込み)

	-A	プロット	τ	עליי	ショートカット		エディター	パプリッン	1	表示			0 🗗 🕤	ドキュメンラ
新規作成	t III (	□ □ 77 保存 ● □ 印 ファイル	rイルの検索 較 マ 刷 マ	↓ シ   ◆ シ   移動 ◆   く 検索 ◆   ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・	挿入 🔜 コメント % インデント 🛐 編	fx ₽ 323 3 121 1	A ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・	レ 実行 マ	実行して 次に進む	<ul> <li>セクションの実行</li> <li>次に進む</li> <li>実行</li> </ul>	実行および 時間の計測			i
	•	om.					名前	を付けて保存	するファイ	ルの選択				×
リ兄1主の.	٠	∋ - ↑ 🎚	→ PC →	Win-8 (C:)	► CTR ► DA	TA ⊧	Mg-TD-split → 15-	90 → REVERS	SE ⊨ MTE	X		✓ C MTEXの検索		P
E E	整理	▼ 新しいフ	オルダー										•	•
Щ. Ф.		EBSD	-OIM			^	名前	^		更新日時	種類	サイズ		
		HCP	roispiay							検索条件に一	-致する項目はありません	2		
		HKLU	IVW aplata Bak	figuro										
		linven	seContour	Display										
		linver:	seDisplay											
		Mg-TI	D-split											
		15-9	90											
		📕 de	efocus EVERSE											
1028.4		J. 1	MTEX											
1021()		MTEX				~								
名前▲		ファイル名(N):	MgTDSpli	it.m										*
CS	יד	イルの種類(T):	MATLAB :	コード ファイル (	*.m)									~
0 hai														
💷 pf 👍 pnai														
SS 😰	ל 🍝	オルダーの非表示										保存(S)	キャンセ	اند. اند

#### 極点図が読み込まれる。

名前 🔺	値
CS 🕄	12x2 crystalSymmetry
🚹 fname	1x3 cell
🖸 h	1x3 cell
😰 pf	73x48 PoleFigure
👍 pname	'C:¥CTR¥DATA¥Mg-TD-split¥15-90¥RE
😰 SS	1x1 specimenSymmetry

### MTEX(極点図表示、ODF計算)

>> plot(pf,'contour')



>> odf=calcODF(pf)

ワークスペース	$\odot$
名前 🔺	値
CS CS	12x2 crystalSymmetry
🚹 fname	1x3 cell
🚹 h	1x3 cell
😰 odf	1x1 ODF
😰 pf	73x48 PoleFigure
👍 pname	'C:¥CTR¥DATA¥Mg-TD-split¥15-90¥RE
SS SS	1x1 specimenSymmetry

#### MTEX(ODF図表示)

>> plot(odf,'contour','sections',12)



Ψ1=360データなし、ψ2=60データなし

### MTEX(再計算極点図)

>> rpf=calcPoleFigure(odf,h)
>> plot(rpf,'contour')



```
>> r=[xvector,yvector,zvector]
```

```
>> plotIPDF(odf,r,'contour')
```



RD

TD



注意:極点図、逆極点図は、等角度で表示されている、 一般的には、等面積表示である。

### MTEX(ODF図, 再計算極点図、逆極点図のExport)



サイズ

31 KB

30 KB

30 KB

## CTRソフトウエアでMTEXのError評価

ValueODFVF

#### ValueODFVF Ver2.34以降は4指数のまま解析可能2019/02/11





Rp%が±1.5%以内で良好



CTRでODF解析

0

1 0

 $\frac{1}{\sqrt{3}}$   $-\frac{1}{3}$  0

0

0

a/c

 $\frac{2}{3}$ 

 $-\frac{1}{3}$ 

0

k i

 $\boldsymbol{v}$ 

t

w

=

=

0

 $-\frac{\sqrt{3}}{2}$   $-\frac{1}{2}$  0

0 0 c/a

0

 $-\frac{1}{\sqrt{3}}$ 

 $\sin \phi_2 \sin \phi$ 

 $\cos \phi_2 \sin \phi$ 

 $\cos\phi$ 

 $\cos\phi_1\cos\phi_2 - \sin\phi_1\sin\phi_2\cos\phi$ 

 $-\cos\phi_1\sin\phi_2 - \sin\phi_1\cos\phi_2\cos\phi$ 

 $\sin \phi_1 \sin \phi$ 



#### 非対称ODF図から1/4極点図を取得

#### 3指数<->4指数変換

M HexaConvert 1.10ST[19/03/31] by CTR – 🗆 📉
File Step Help
A □ X-Axis[100] ([2-1-10])
Miller Notation (3Axis Notation)         1         0         0         hkl         uvw
Miller Bravais Notation(4 Axis Notation)       0     1       0     1       1     3       2     -1       -1     0       hkil     uvxw
Euler(p1Fp2) 0.0 32.024 30.0
Material select
Magnesium.TXT v
c/a 1.625 Input ψ2 Angles 0 Calc
DISP
Position 10 V Disp size 200 V DISP
BG Corr Black v Line size 1.0 v MINUS
OK Return Structure



#### Direction <uvw> to <UVTW>

U=(2u-v)/3 V=(2v-u)/3 T=-(u+v)/3 W=w for example: <100> is equal <2-1-10>. <210> is equal <10-10>

#### Plane {uvw} to {UVTW} : U=u V=v

#### V=v V=v T=-(u+v) w=Wfor example: {2-10} is equal {2-1-10}; {10-10} ise equal {100}.

## CTRでMgの方位解析



#### 複数の解析結果の比較が可能

<b>24</b>	hkluvwlistDisplay 1.05T[19/03/31] by CTR	- 🗆 🗙	4	hkluvwlistDisplay – 🗆 🗙
File DISPSample Help				C:\CTR\work\hkluvwlistDisplay\hkluvwlist.csv
C:\CTR\DATA\Mg-TD-split\15-90\REVERSE\W	ITEX\mtex2.csv	DispODF REVERSE	7	, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,
<b>*</b>	⊖ Dispselect	DispODF	6 -	5.
<b>F</b>	⊖ Dispselect	DispODF	5.	5.
<b>2</b>	⊖ Dispselect	DispODF	Hg ₄.	4
	⊖ Dispselect	DispODF	3.	3-
<b>*</b>	⊖ Dispselect	DispODF	2 ·	22
<b>*</b>	⊖ Dispselect	DispODF	1.	
<b>F</b>	⊖ Dispselect	DispODF	0.1	2215
MakeCSVFile Load C:\CTR\work\hkluvw	listDisplay\hkluvwlist.csv V-Axis ODF	hkluvwlistDisplayGraph		001)<10 
Comment C:\CTR\work\hkluvw	istDisplay\hkluvwlist.csv			
				{hkt} <uvv> +==REVERSE</uvv>

# CTRソフトウエアで再計算極点図解析(配向関数)



## CTRソフトウエアで逆極点図解析



#### **最後に** MTEXでHexagonal計算は他の資料も参考にしてください。



#### 極点図からMTEXでODF解析する場合、1/4対称で解析する場合、PFtoODF3でhalf処理を行う

<u>26</u>				PFt	ODF3 8.41SKT[19/03/31] by CTR
File	Option	Symmetric	Softw	are Data	Help
Γ	Lattice co	select	•	Full	
	Ma	aterial A	-Ir	Half	ralData.txt
	Structur	e Code(Symm	etr	Quater	les) 7 - O (cubic)
	a 1.0	<=h 1.0		Fiber	alpha 90.0 heta 90.0 gamm 9

1/4対称ODF図を得るにはODFをExportし、GPODFDisplayでOrthorombic図を計算する

MTEX(f1 F f2 Value)			Triclinicで使用	
MTEX(Triclinic(1/4) to Orthorhombic)		(Hexa BType ) or Other	Orthorombicで使用 使用しない	
MTEX(Triclinic to Orthorhombic)	1	(Hexa BType) to (Hexa ATyype)		