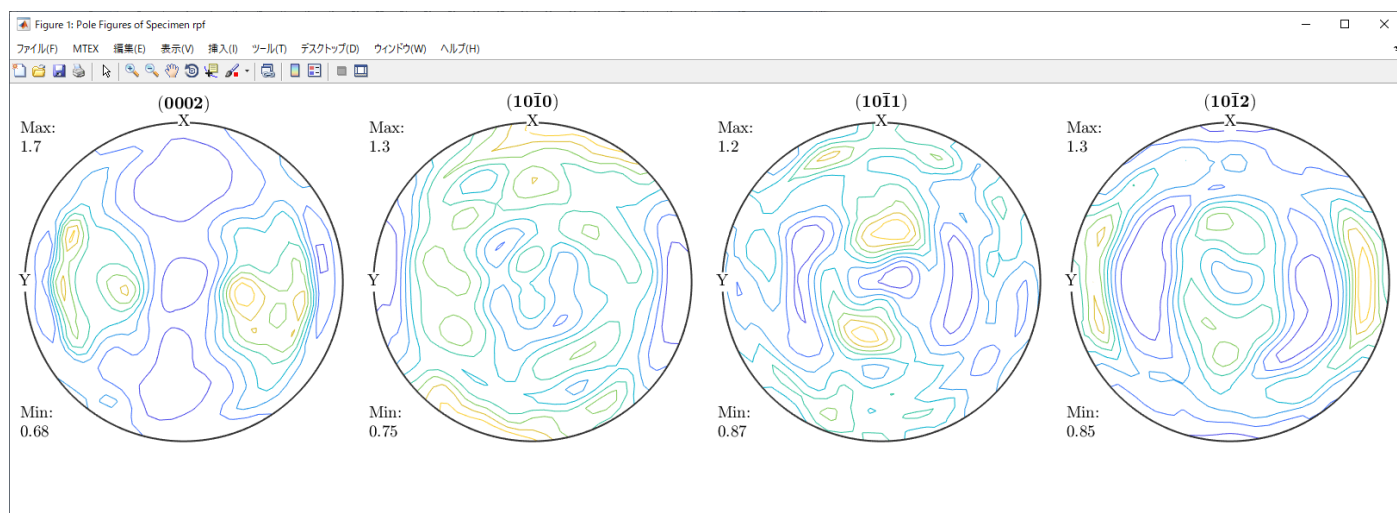


## MTEXによるZnCuTi. UXDの解析



2020年12月13日

*HelperTex Office*

1. 概要

MTEXのPoleFigureDataとしてZnCuTiが付属している。

mtex-5.4.0 > data > PoleFigure > ZnCuTi

名前	更新日時	種類	サイズ
ZnCuTi_defocusing_PF_002_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_defocusing_PF_100_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_defocusing_PF_101_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_defocusing_PF_102_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_002_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_100_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_101_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_102_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB

2  $\theta$  角度は

指数	2 $\theta$ 角度
002	36.54
100	39.13
101	43.395
102	54.566

Zn をベースにした合金と近い Zr を参考に

Zirconium-HexagonalDISP						
Hexagonal						
3.232	(1.0)					
3.232	(1.0)					
5.147	(1.5925)					
90.0						
90.0						
120.0						
1.54056						
16						
1	0	0	33.0	2.799	31.948	
0	0	2	32.0	2.5735	34.833	
1	0	1	100.0	2.4589	36.512	
1	0	2	17.0	1.8944	47.983	

{100},{002}から格子定数を求めると

ZnCuTi-edit						
Hexagonal						
2.6558	(1.0)					
2.6558	(1.0)					
4.9134	(1.8501)					
90.0						
90.0						
120.0						
1.54056						
16						
1	0	0	33.0	2.3	39.134	
0	0	2	32.0	2.4567	36.546	
1	0	1	100.0	2.0831	43.404	
1	0	2	17.0	1.679	54.616	
1	1	0	17.0	1.3279	70.911	

後で、格子定数の問題でエラー発生するが回避

このデータを以下の手順でMTEXで解析を行う

## 2. 解析手順

defocusファイルをUXD→ASC変換

ASCdefocusからdefocusプロファイル作成

配向UXDをASC変換

配向ASCデータの極点処理 (defocus、規格化)

MTEX入力データ作成

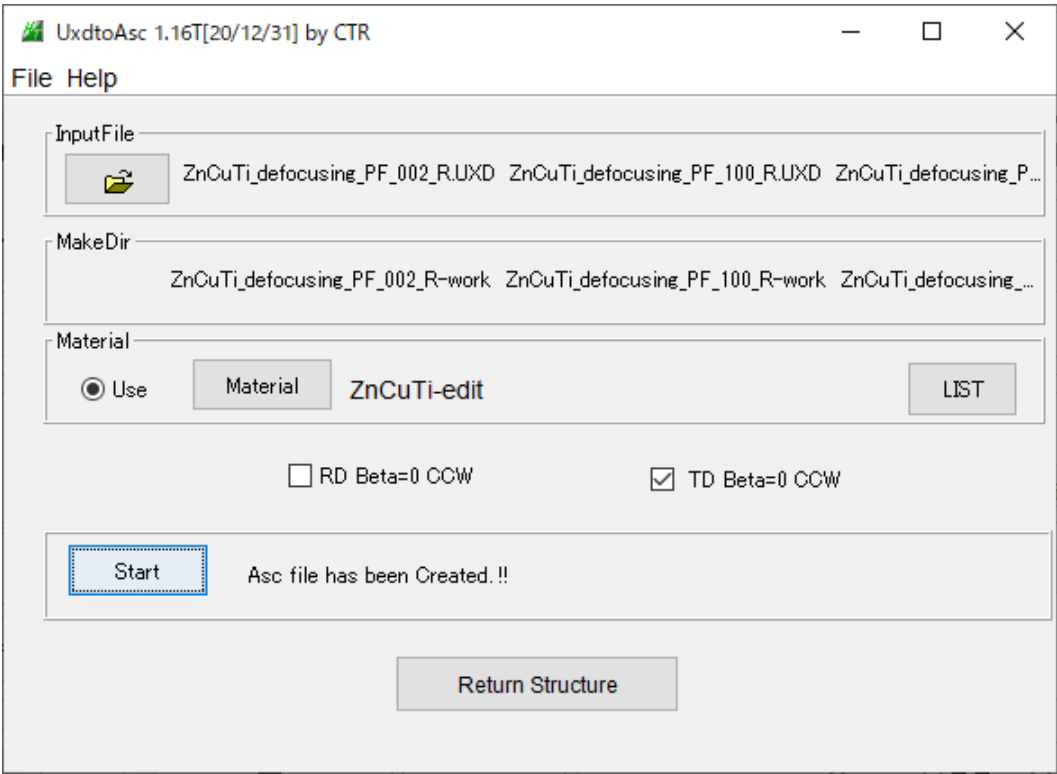
MTEXで解析

再計算極点図をExportしRp%を計算

ODFの解析

3. defocus ファイルをUXD→ASC変換

UXDのASC変換は、UxdtoAsc ソフトウェアで行うが、従来の変換では  
1つのファイルに複数の極点図で構成されていたが、今回は複数のファイルに対応するため変更

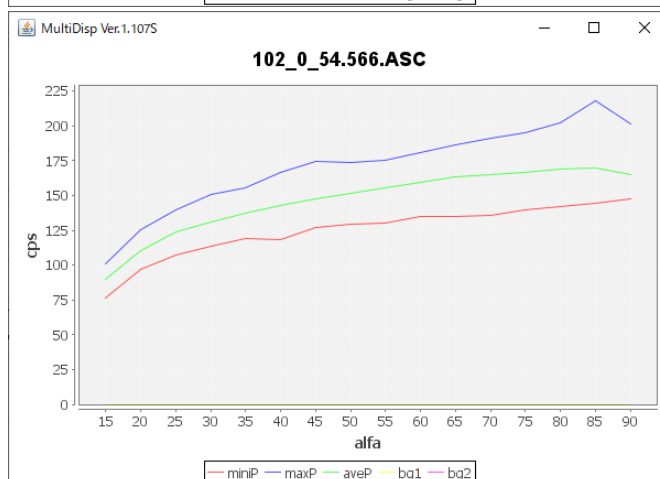
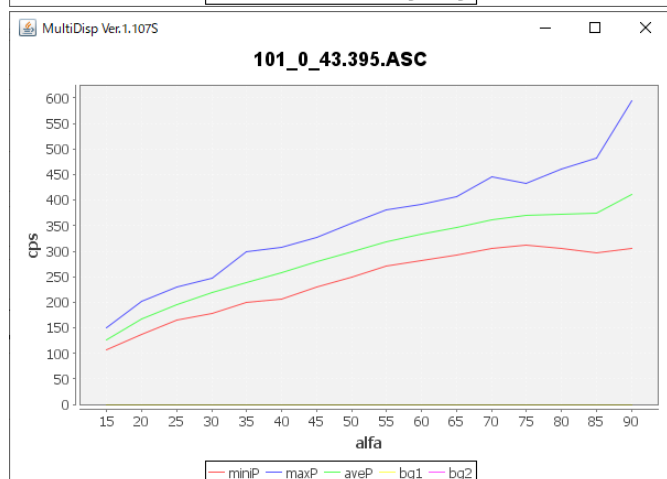
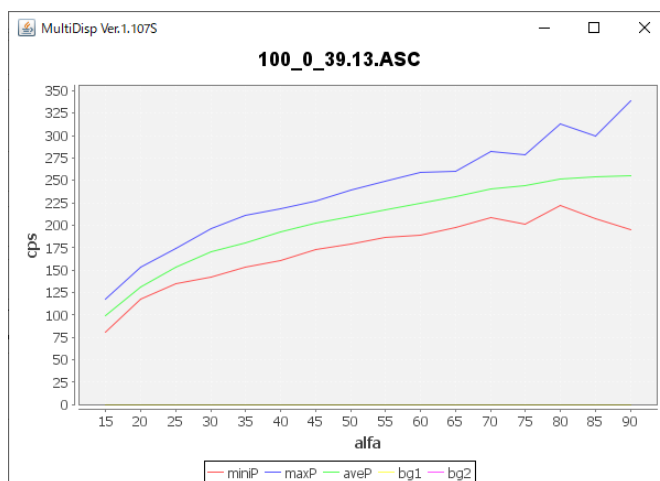
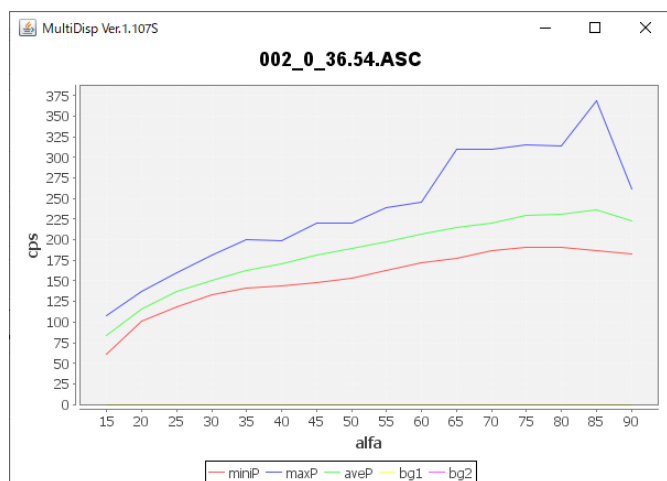
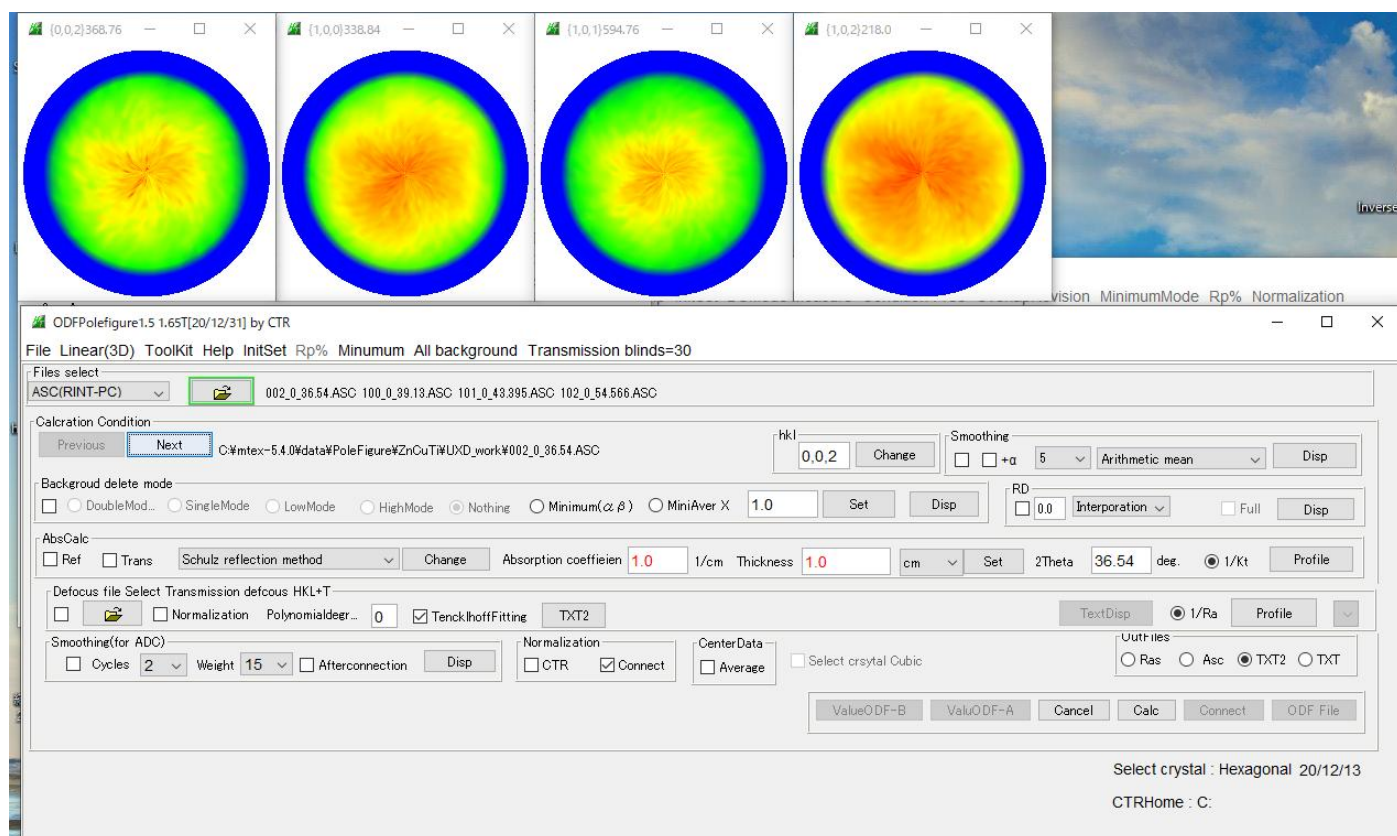


結果

> mtex-5.4.0 > data > PoleFigure > ZnCuTi				
名前	更新日時	種類	サイズ	
UXD_work	2020/12/13 3:51	ファイル フォルダー		
ZnCuTi_defocusing_PF_002_R-work	2020/12/13 3:51	ファイル フォルダー		
ZnCuTi_defocusing_PF_100_R-work	2020/12/13 3:51	ファイル フォルダー		
ZnCuTi_defocusing_PF_101_R-work	2020/12/13 3:51	ファイル フォルダー		
ZnCuTi_defocusing_PF_102_R-work	2020/12/13 3:51	ファイル フォルダー		
ZnCuTi_defocusing_PF_002_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB	
ZnCuTi_defocusing_PF_100_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB	
ZnCuTi_defocusing_PF_101_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB	
ZnCuTi_defocusing_PF_102_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB	
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_002_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB	
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_100_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB	
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_101_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB	
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_102_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB	
> mtex-5.4.0 > data > PoleFigure > ZnCuTi > UXD_work				
名前	更新日時	種類	サイズ	
002_0_36.54.ASC	2020/12/13 3:51	RINT20007スケー	15 KB	
100_0_39.13.ASC	2020/12/13 3:51	RINT20007スケー	15 KB	
101_0_43.395.ASC	2020/12/13 3:51	RINT20007スケー	15 KB	
102_0_54.566.ASC	2020/12/13 3:51	RINT20007スケー	15 KB	

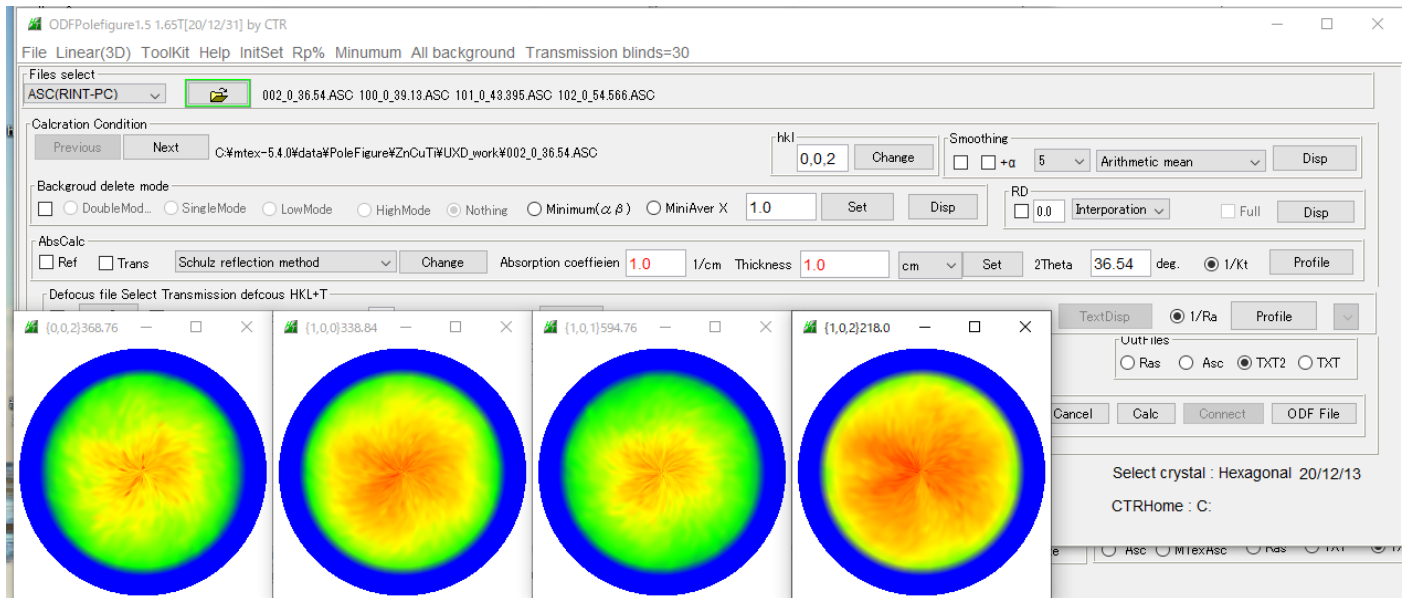
#### 4. ASCdefocusからdefocusプロファイル作成

ASCファイルの処理はODFPoleFigureソフトウェアで行う

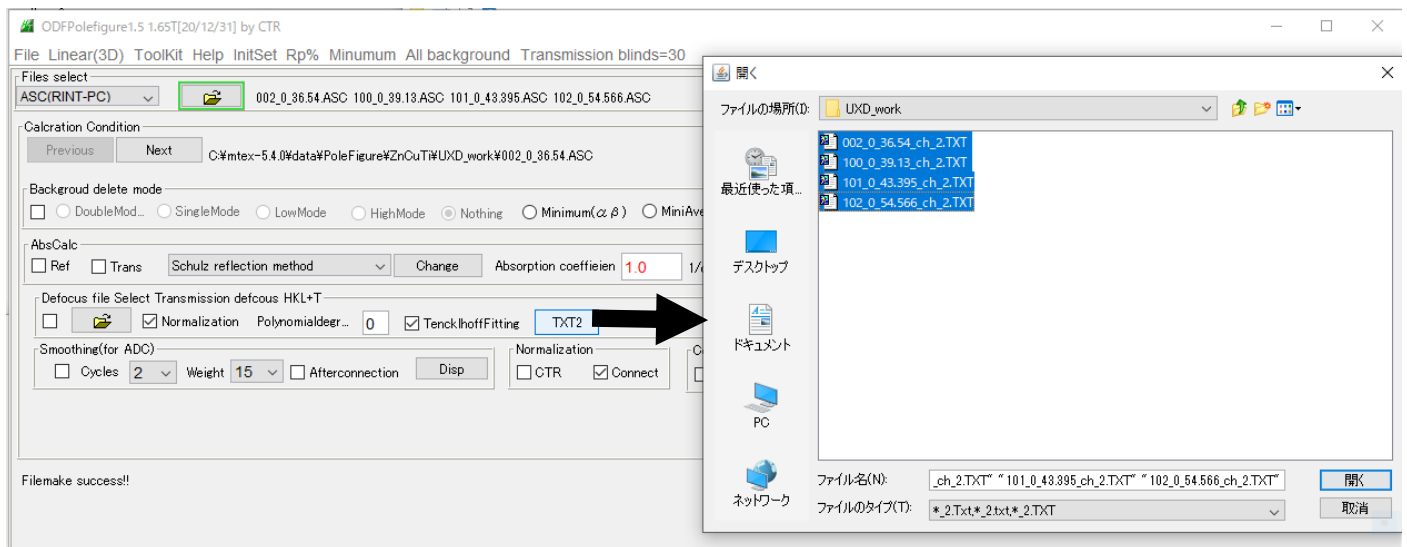


バックグラウンドは測定されていない。

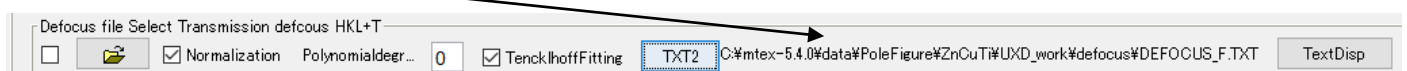
#### 4. 1 ODFPoleFigure処理でASCからTXT2に変換される



#### 4. 2 TXT2からdefocusプロファイル作成



複数選択を開くとプロフィールファイルが登録されます。



Defocus file Select Transmission defocus HKL+T

☐ ☒ Normalization Polynomialdegr... 0 ☒ TenckhoffFitting **TXT2** C:\mtex-5.4.0\data\PoleFigure\ZnCuTi\UXD\_work\defocus\DEFOCUS\_F.TXT TextDisp

> mtex-5.4.0 > data > PoleFigure > ZnCuTi > UXD\_work

名前	更新日時	種類	サイズ
defocus	2020/12/13 4:07	ファイル フォルダー	
002_0_36.54.ASC	2020/12/13 3:51	RINT2000アスキー	15 KB
100_0_39.13.ASC	2020/12/13 3:51	RINT2000アスキー	15 KB
101_0_43.395.ASC	2020/12/13 3:51	RINT2000アスキー	15 KB
102_0_54.566.ASC	2020/12/13 3:51	RINT2000アスキー	15 KB
002_0_36.54_ch_2.TXT	2020/12/13 4:01	テキスト文書	22 KB
100_0_39.13_ch_2.TXT	2020/12/13 4:01	テキスト文書	22 KB
101_0_43.395_ch_2.TXT	2020/12/13 4:01	テキスト文書	22 KB
102_0_54.566_ch_2.TXT	2020/12/13 4:01	テキスト文書	22 KB

> mtex-5.4.0 > data > PoleFigure > ZnCuTi > UXD\_work > defocus

名前	更新日時	種類	サイズ
0_1F.TXT	2020/12/13 4:07	テキスト文書	1 KB
1_1F.TXT	2020/12/13 4:07	テキスト文書	1 KB
2_1F.TXT	2020/12/13 4:07	テキスト文書	1 KB
3_1F.TXT	2020/12/13 4:07	テキスト文書	1 KB
DEFOCUS_F.TXT	2020/12/13 4:07	テキスト文書	2 KB
real0_1F.TXT	2020/12/13 4:07	テキスト文書	1 KB
real1_1F.TXT	2020/12/13 4:07	テキスト文書	1 KB
real2_1F.TXT	2020/12/13 4:07	テキスト文書	1 KB
real3_1F.TXT	2020/12/13 4:07	テキスト文書	1 KB

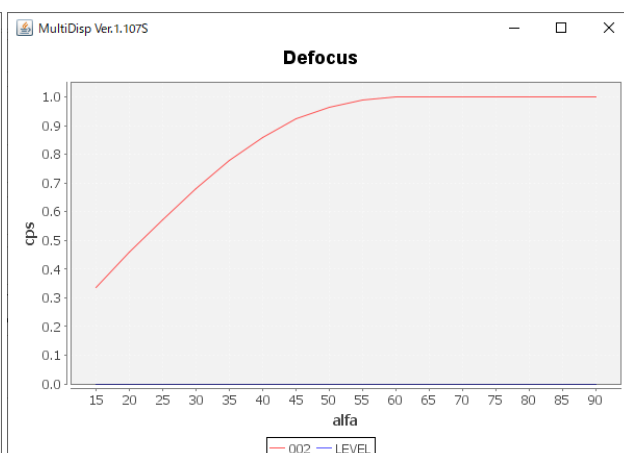
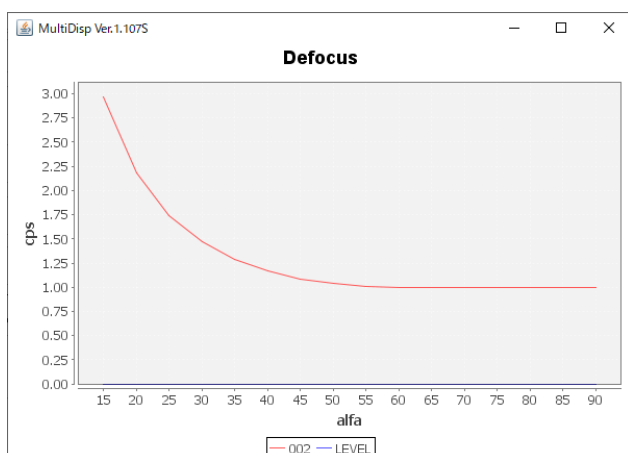
TextDisplay 1.14S C:\mtex-5.4.0\data\PoleFigure\ZnCuTi\UXD\_work\defocus\DEFOCUS\_F.TXT

File Help

filename, alfa number, alfa start angle, alfa step, function-n, mm, 20/12/13 3.10 for DefocusCalc,  
 002\_0\_36.54\_ch\_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 10, 0.2, 0.999998650243903, 8.80260458114987E-4, -4.1922288342598484E-4, 7.58064322732,  
 100\_0\_39.13\_ch\_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 11, 0.2, 0.9999986632444855, 2.818899064960793E-4, -1.1414985334699216E-4, 1.525749277,  
 101\_0\_43.395\_ch\_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 11, 0.2, 1.000003009827145, 6.229587337086527E-4, -3.7439729895737085E-4, 8.762696619,  
 102\_0\_54.566\_ch\_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 11, 0.2, 1.0000005757099069, -1.4051220141030388E-4, 6.0358457042407223E-5, -9.166585E

プロファイルを多項式で近似しています。(極点図の中心は90度)

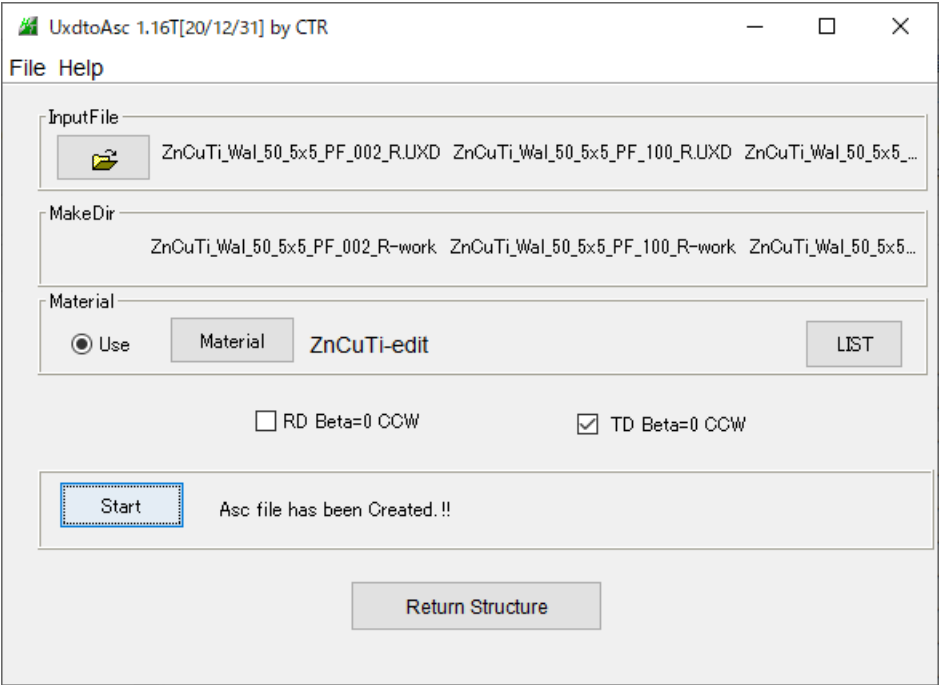
例えば、{002} defocusは、下記右プロファイルの逆数(左)で補正を行います。





5. 配向XRDをASC変換

defocus 処理と同一の処理を行うため、defocusのworkエリアホルダ改名して行う



> mtex-5.4.0 > data > PoleFigure > ZnCuTi

名前	更新日時	種類	サイズ
UXD_work	2020/12/13 4:22	ファイル フォルダー	
UXD_work-defocus	2020/12/13 4:13	ファイル フォルダー	
ZnCuTi_defocusing_PF_002_R-work	2020/12/13 3:51	ファイル フォルダー	
ZnCuTi_defocusing_PF_100_R-work	2020/12/13 3:51	ファイル フォルダー	
ZnCuTi_defocusing_PF_101_R-work	2020/12/13 3:51	ファイル フォルダー	
ZnCuTi_defocusing_PF_102_R-work	2020/12/13 3:51	ファイル フォルダー	
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_002_R-work	2020/12/13 4:18	ファイル フォルダー	
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_100_R-work	2020/12/13 4:18	ファイル フォルダー	
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_101_R-work	2020/12/13 4:18	ファイル フォルダー	
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_102_R-work	2020/12/13 4:18	ファイル フォルダー	
ZnCuTi_defocusing_PF_002_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_defocusing_PF_100_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_defocusing_PF_101_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_defocusing_PF_102_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_002_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_100_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_101_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB
ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_102_R.UXD	2020/10/12 5:24	UXD ファイル	33 KB

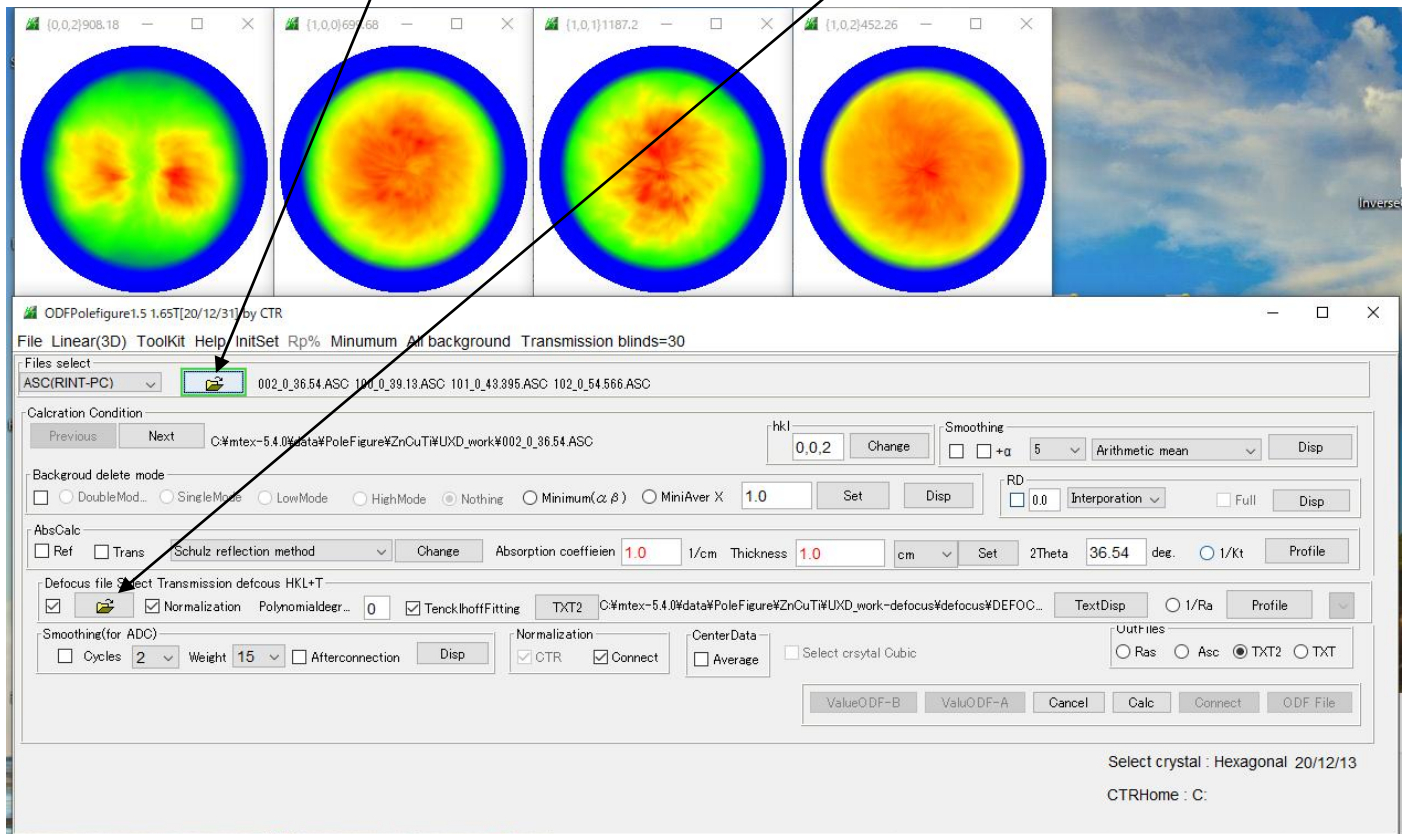
> mtex-5.4.0 > data > PoleFigure > ZnCuTi > UXD\_work

名前	更新日時	種類	サイズ
002_0_36.54.ASC	2020/12/13 4:22	RINT20007スキー	15 KB
100_0_39.13.ASC	2020/12/13 4:22	RINT20007スキー	15 KB
101_0_43.395.ASC	2020/12/13 4:22	RINT20007スキー	15 KB
102_0_54.566.ASC	2020/12/13 4:22	RINT20007スキー	15 KB

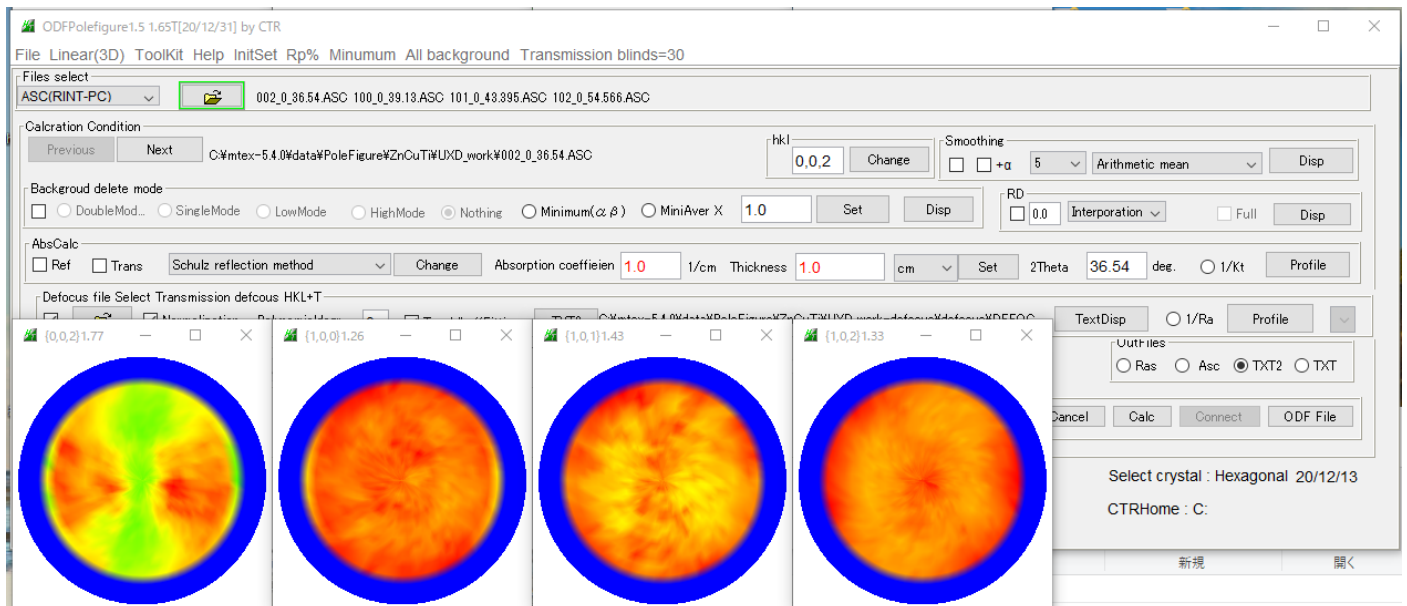


## 6. 配向ASCデータの極点処理 (defocus、規格化)

defocusプロファイルのホルダが変更されているため、再選択を行う  
配向極点図 (ASC) を選択



Calcでdefocus補正+規格化が行われます。



mtex-5.4.0 > data > PoleFigure > ZnCuTi > UXD\_work

名前	更新日時	種類	サイズ
002_0_36.54.ASC	2020/12/13 4:22	RINT2000731-	15 KB
100_0_39.13.ASC	2020/12/13 4:22	RINT2000731-	15 KB
101_0_43.395.ASC	2020/12/13 4:22	RINT2000731-	15 KB
102_0_54.566.ASC	2020/12/13 4:22	RINT2000731-	15 KB
002_0_36.54_chDS_2.TXT	2020/12/13 4:28	テキスト文書	26 KB
100_0_39.13_chDS_2.TXT	2020/12/13 4:28	テキスト文書	26 KB
101_0_43.395_chDS_2.TXT	2020/12/13 4:28	テキスト文書	26 KB
102_0_54.566_chDS_2.TXT	2020/12/13 4:28	テキスト文書	26 KB

\_\_chDSはdefocus+規格化

## 7. MTEX入力データ作成

ValueODF-B    ValuODF-A    Cancel    **Calc**    Connect    **ODF File**

PfToODF3 8.47T[20/12/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material ZnCuTi-edit.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenflies) 11 - D6 (hexagonal)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.8501 alpha 90.0 beta 90.0 gamm 120.0

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
002_0_36.54_chDS_2.TXT	0,0,2	36.54	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
100_0_39.13_chDS_2.TXT	1,0,0	39.13	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
101_0_43.395_chDS_2.TXT	1,0,1	43.395	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
102_0_54.566_chDS_2.TXT	1,0,2	54.566	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" 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"/>

Comment 002\_0\_36.54\_chDS\_2.TXT 100\_0\_39.13\_chDS\_2.TXT 101\_0\_43.395\_chDS\_2.TXT 102\_0\_54.566\_chDS\_2.TXT

Symmetric type Full

Center Data

Average

Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

labotex

Material ZnCuTi-edit.txt

で ZnCuT を選択で、指数の確認を行う。

PfToODF3 8.47T[20/12/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Outside text(Vector) CCW

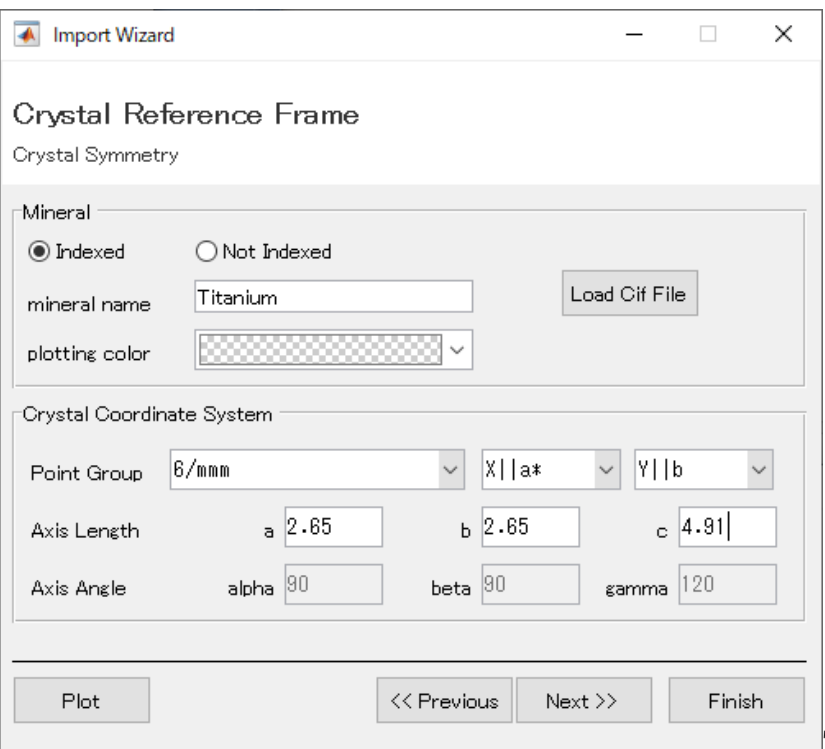
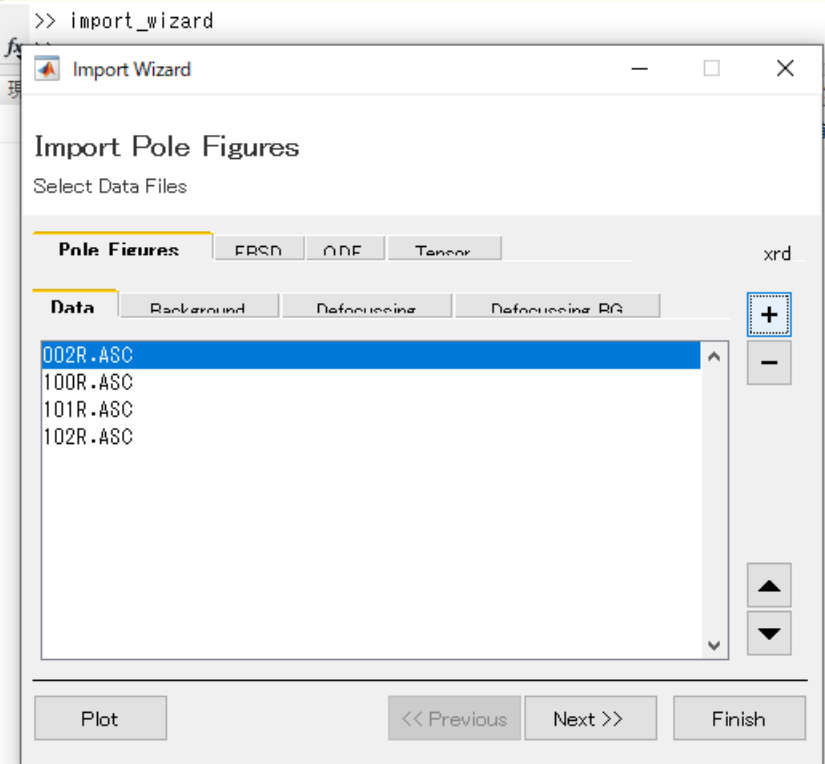
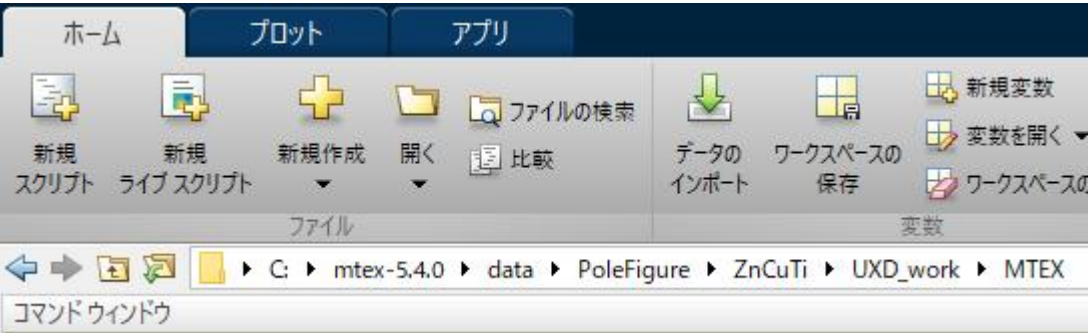
\*MTEX(ASC) CCW

Asc(CCW) file save

mtex-5.4.0 > data > PoleFigure > ZnCuTi > UXD\_work

名前	更新日時	種類	サイズ
MTEX	2020/12/13 4:35	ファイル フォルダー	
002_0_36.54.ASC	2020/12/13 4:22	RINT20007スキー	15 KB

8. MTEXで解析  
ホルダ選択



Titanium の格子定数を変更

再計算極点図をE x p o r t しR p %を計算

Import Wizard

## Specimen Reference Frame

Specimen Symmetry

Specimen Coordinate System

rotate data by Euler angles (Bunge) in degree

specimen symmetry

MTEX Plotting Convention

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

Import Wizard

## Miller Indices

Correct Miller Indices

Imported Pole Figure Data Sets

(---)	002R.ASC
(10-10)	100R.ASC
(---)	101R.ASC
(---)	102R.ASC

Miller Indices

h

k

i

l

Structure Coefficients

c

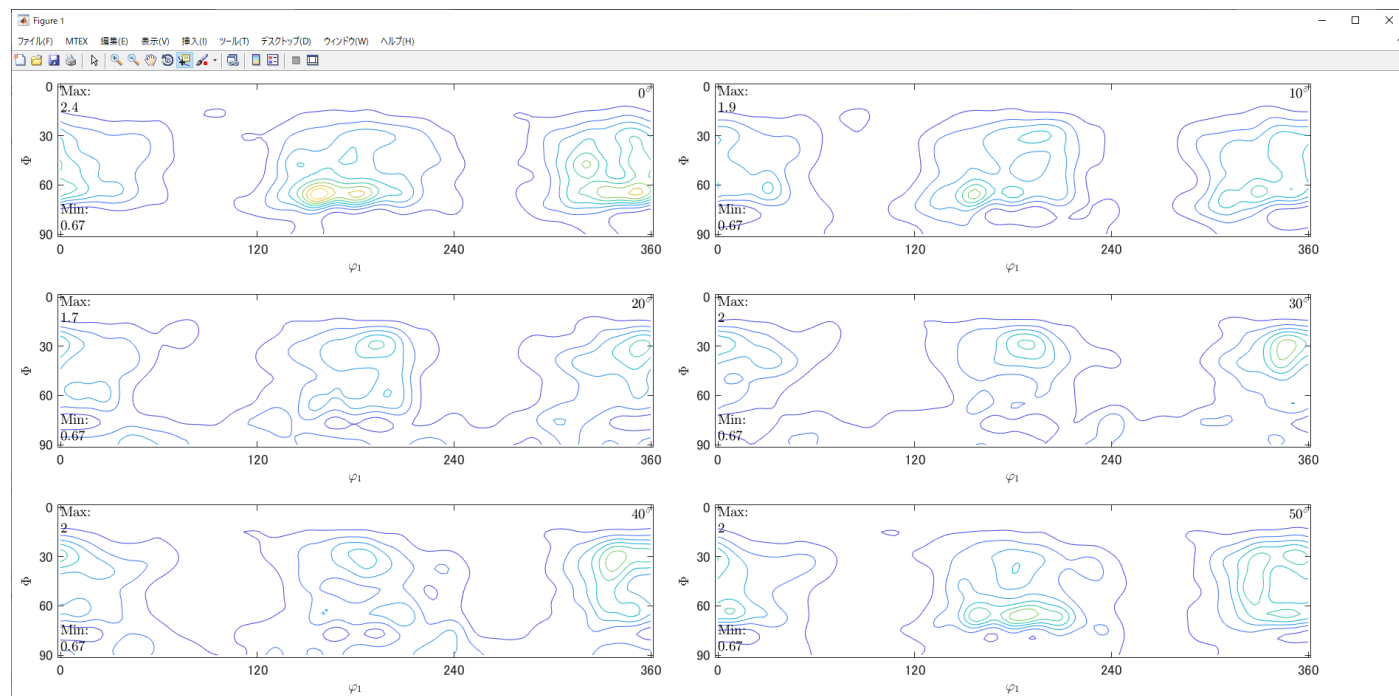
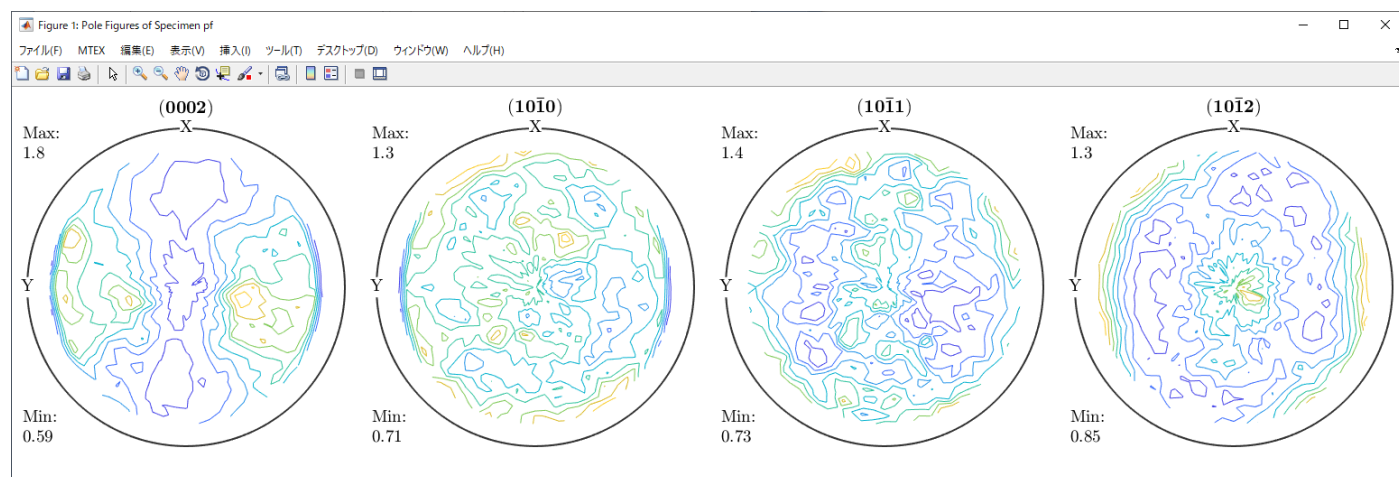
For superposed pole figures separate multiple Miller indece and structure coefficients by space!

格子定数が少しずれているため、エラー発生するも、mファイルを作成し修正

```
h = { ...
    Miller(0,      0,      0,2.095600e+00,CS),...
    Miller(1, 0,-1, 0,CS),...
    Miller(1,      0,      -1,1.047800e+00,CS),...
    Miller(1,      0,      -1,2.095600e+00,CS),...
};
```

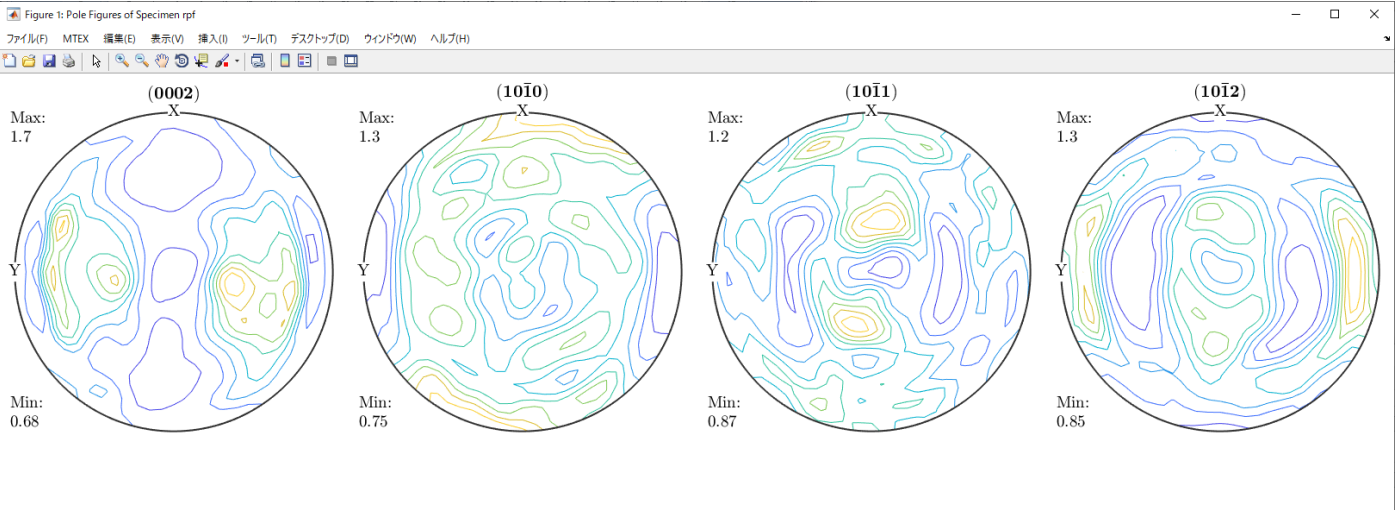
```
h = { Miller(0,0,0,2,CS), Miller(1, 0,-1, 0,CS),Miller(1,0,-1,1,CS), Miller(1,0,-1,2,CS)};↓
```

に修正



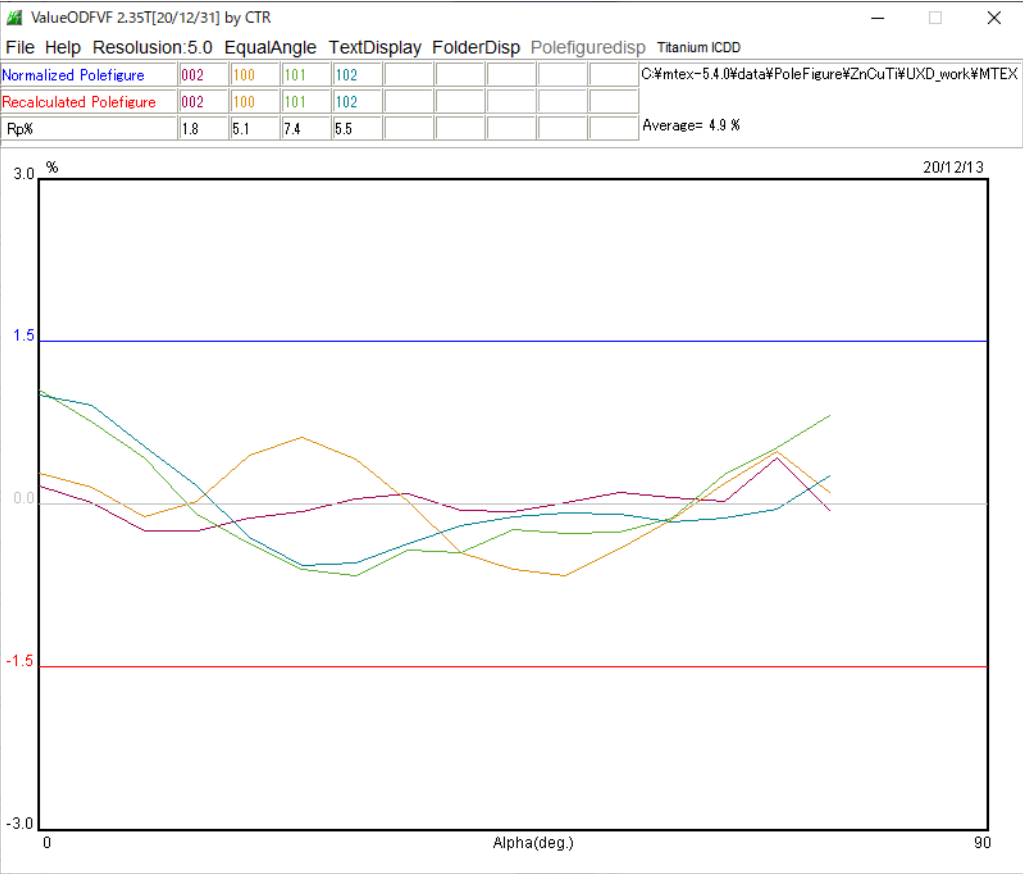
PFをExport

9. 再計算極点図をE x p o r t しR p %を計算



現在のフォルダー

- 名前 ▲
- 002R.ASC
- 100R.ASC
- 101R.ASC
- 102R.ASC
- ODF.TXT
- pole\_(0002).txt
- pole\_(10-10).txt
- pole\_(10-11).txt
- pole\_(10-12).txt
- ZnCuTi.m



バックグラウンド削除していないためか、良好な Rp%が得られる。

10. ODFの解析

10.1 Triclinic→Orthorhombic

