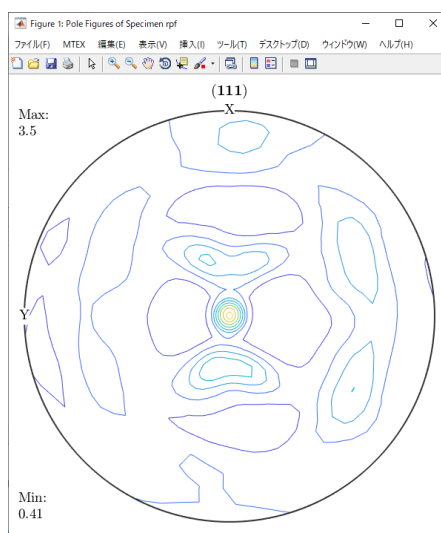
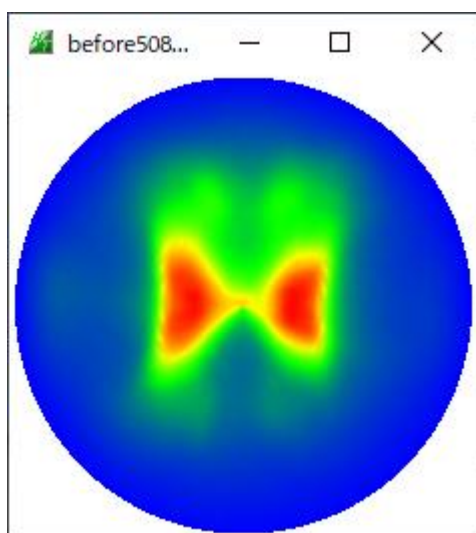


MTEXによる x r d m l ファイルの解析



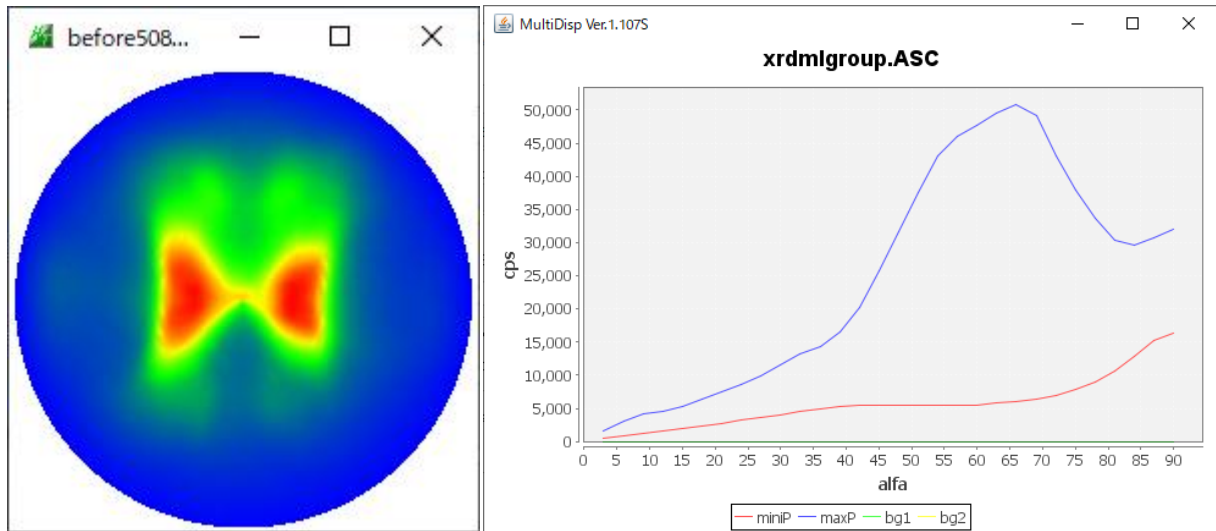
2020年12月09日

HelperTex Office

不明な点があればご質問下さい。

1. 概要

MTEXのPoleFigureデータとしてxrdml. xrdmlデータが添付されている。
xrdmlでは、RDが極点図の右側であることが知られている。
xrdml. xrdmlは材料がCuでFCCの β -Fiberのデータと思われる。
 $\beta = 0$ をRDとして読み込むと



FCCの β -Fiberが90度回転している。
又、極点図の外側に向けて密度が低下するdefocusが認められる。
2つの問題が存在する。

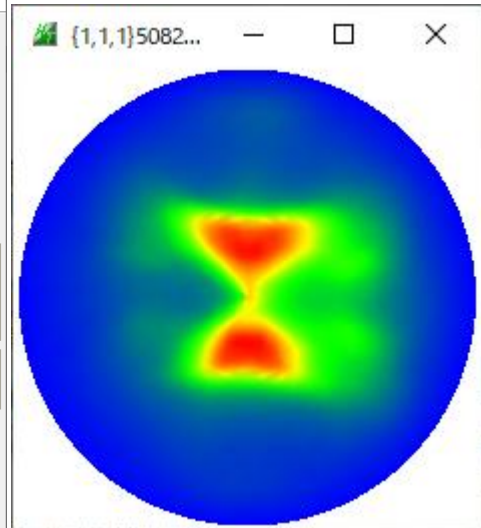
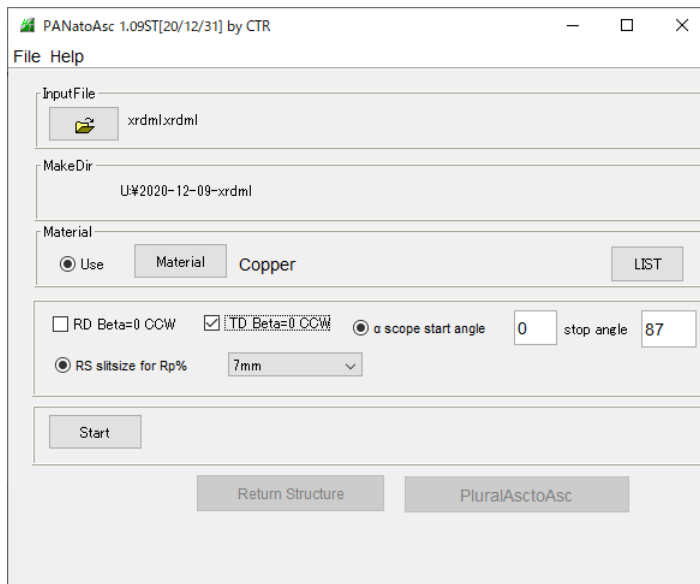
MTEXではデータ読み込む際にX軸方向を選択できるが選択によりODF図の回転に影響する
又、調べる限りdefocusの対応はありません。(correct()では別にデータが必要)
この2点の解決を考えます。

最初に、xrdmlをASCに変換し、MTEXで解析
xrdmlを直接MTEXで解析を行い、読み込むパラメータを確定

defocusデータがない場合のdefocus補正を行い
defocusの効果を説明します。

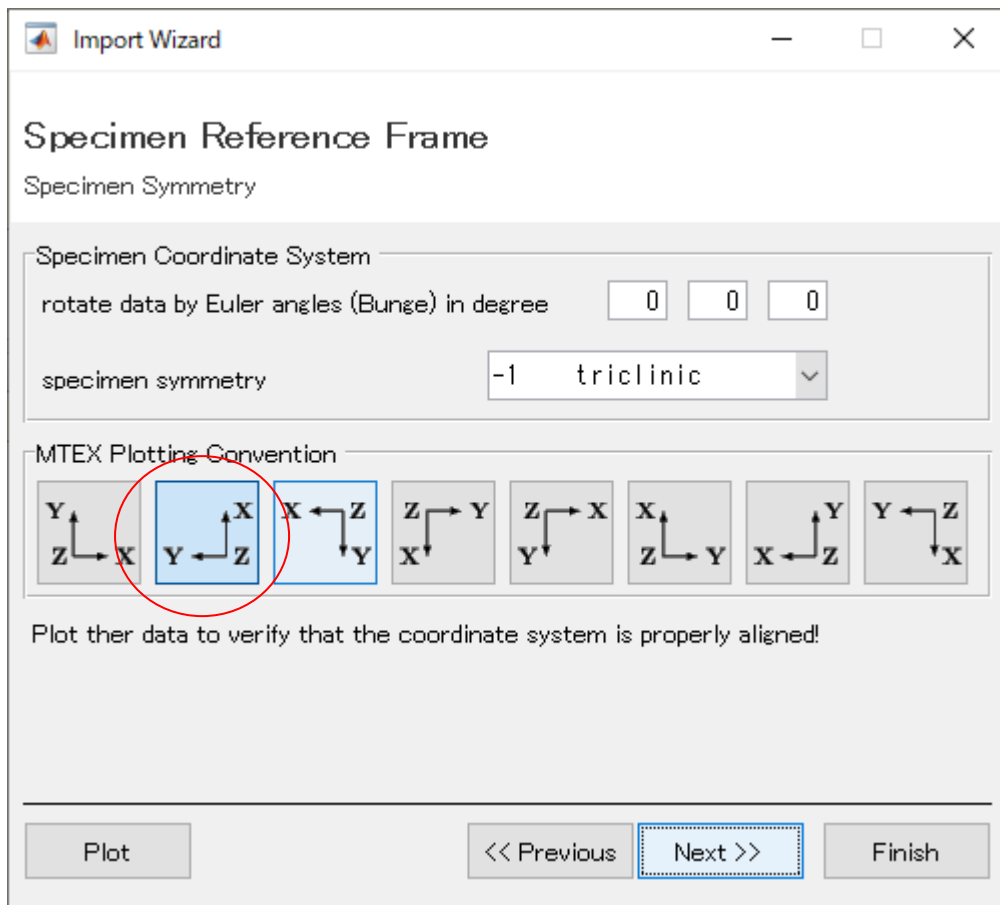
2. 一般的なMT E X解析 (CCW)

極点図のRD方向を時計の12時方向としたASCファイルをMT E Xで解析



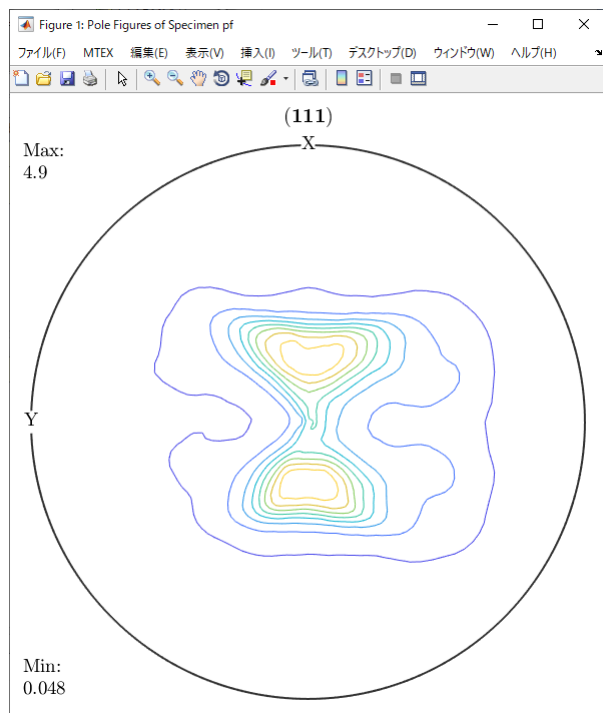
データ変換したデータ (ASC) ファイルをMT E Xで読み込む

3. MT E Xに読み込む

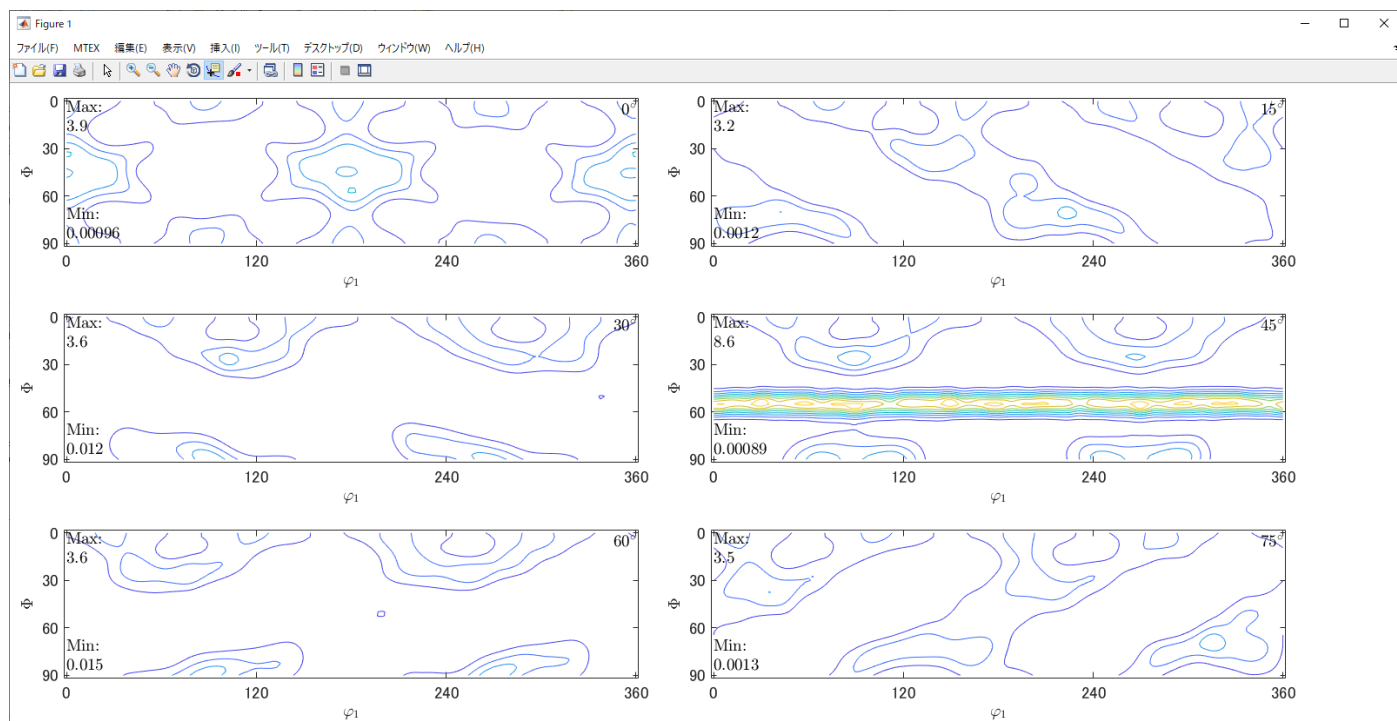
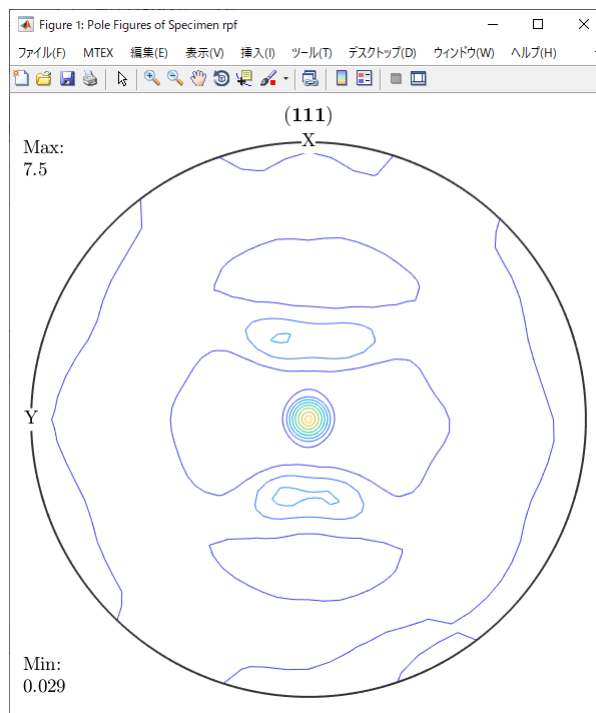


`plot(pf,'contour','projection','stereo')`

入力極点図

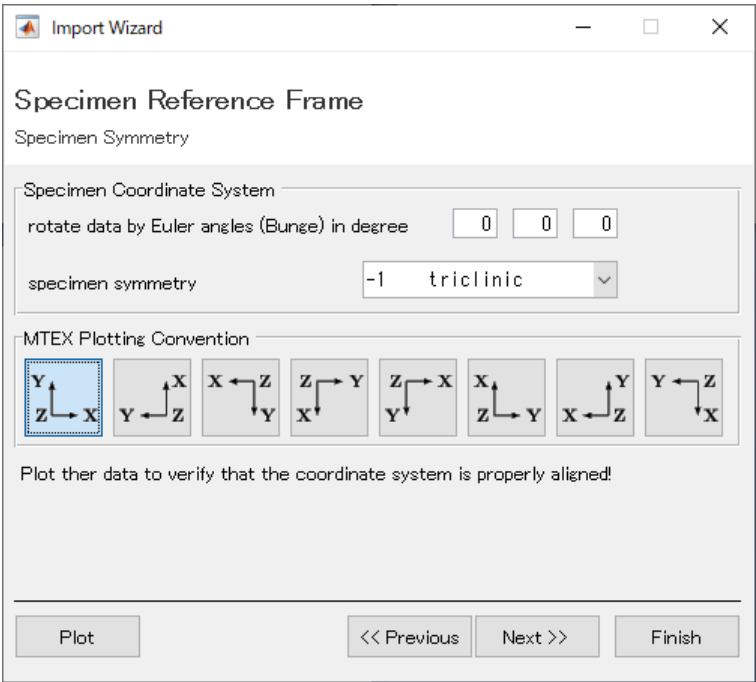
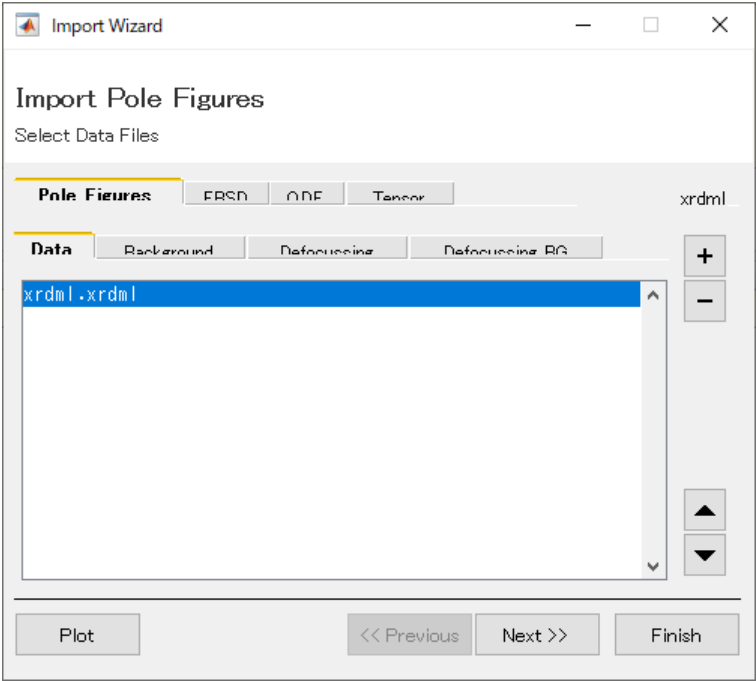


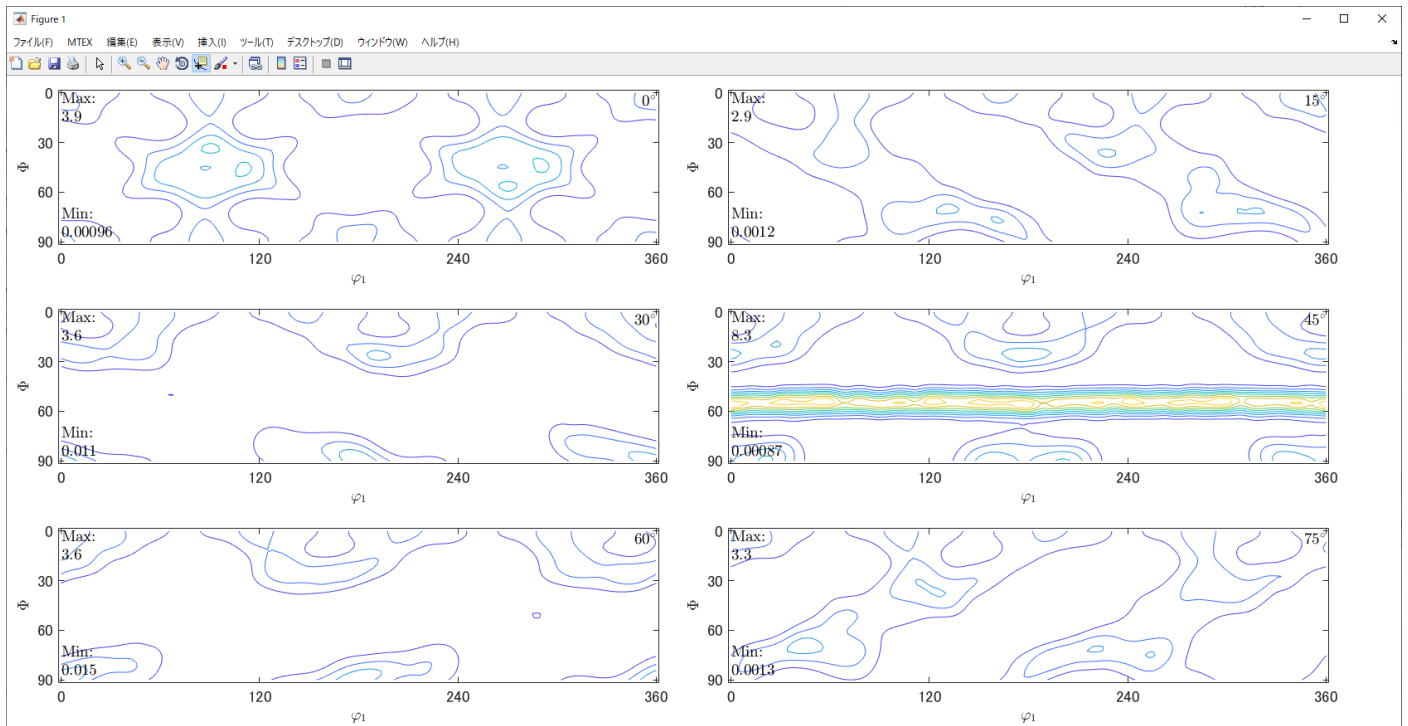
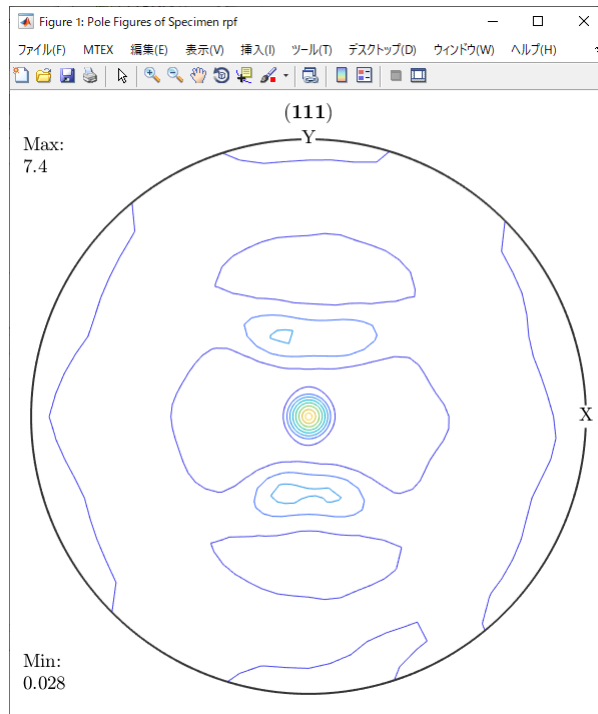
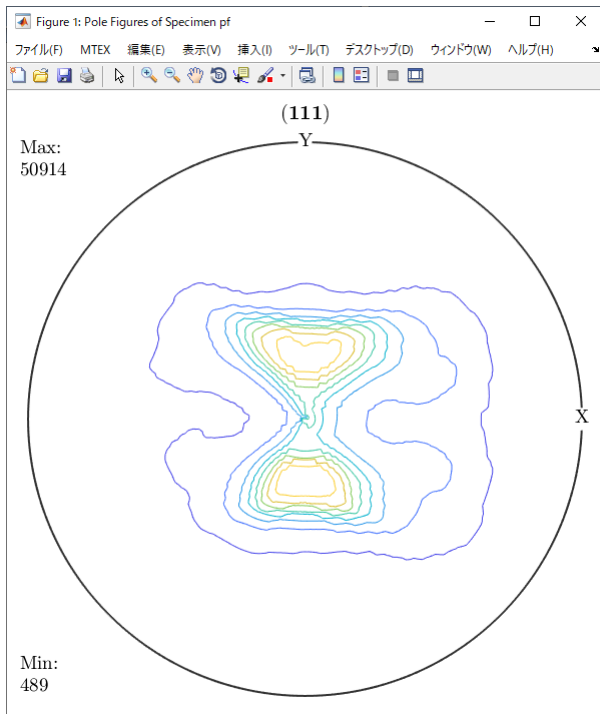
再計算極点図



x r d m l を直接読み込む場合、このODF図が得られるパラメータを探す

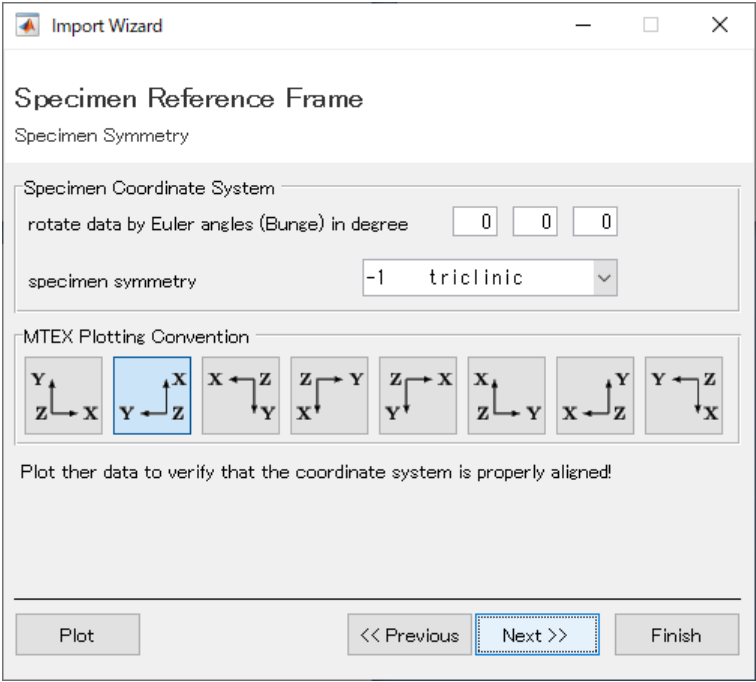
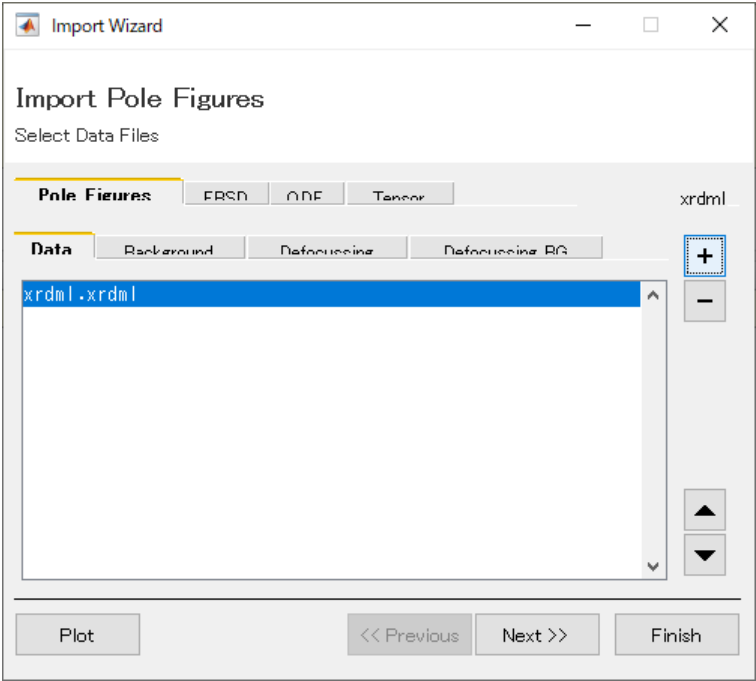
3. x r d m l データを直接、X軸右として読み込む

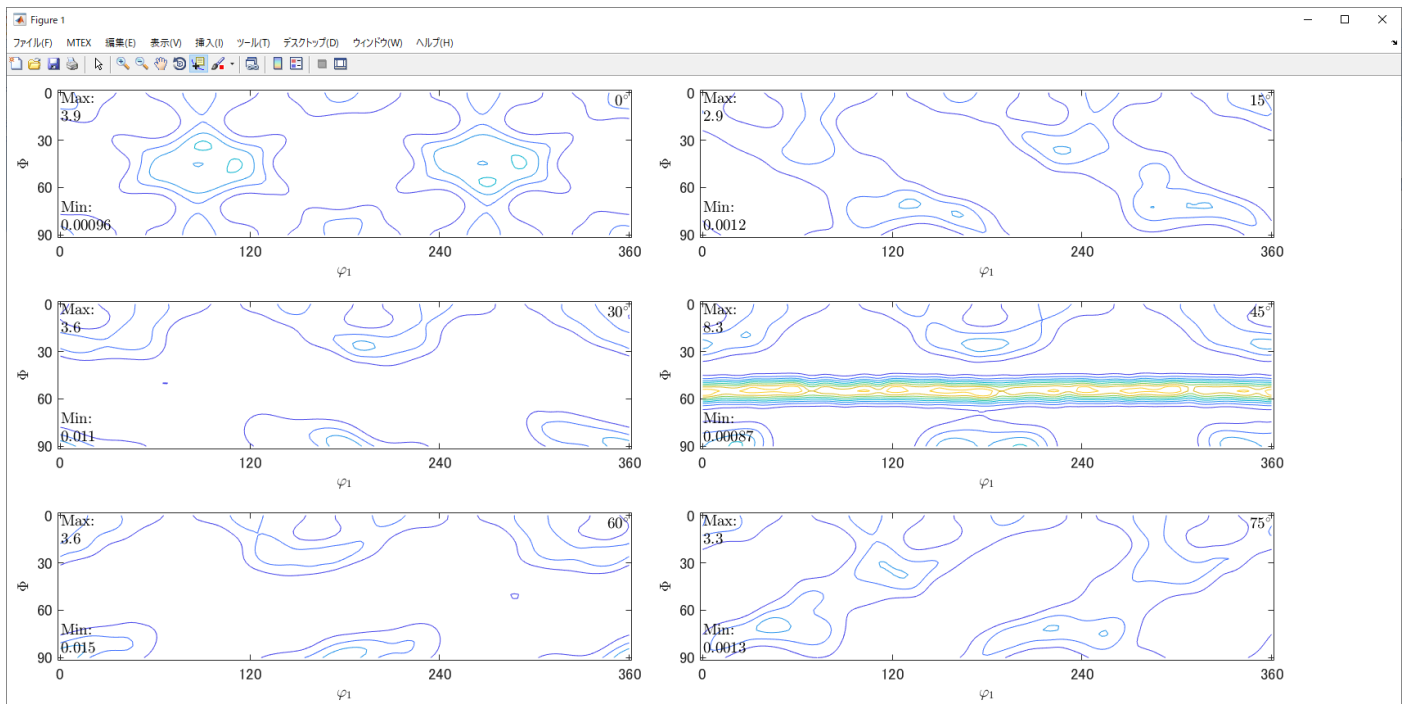
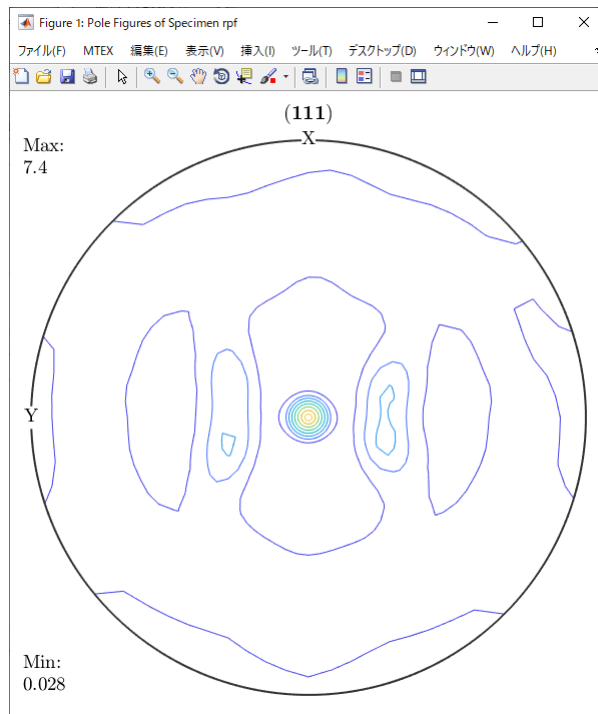
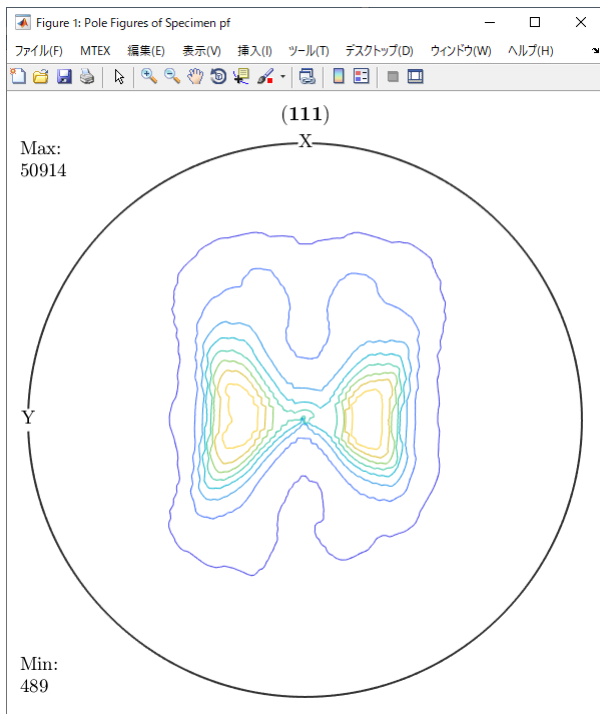




一般系と同じ極点図では、ODFが90度回転している。

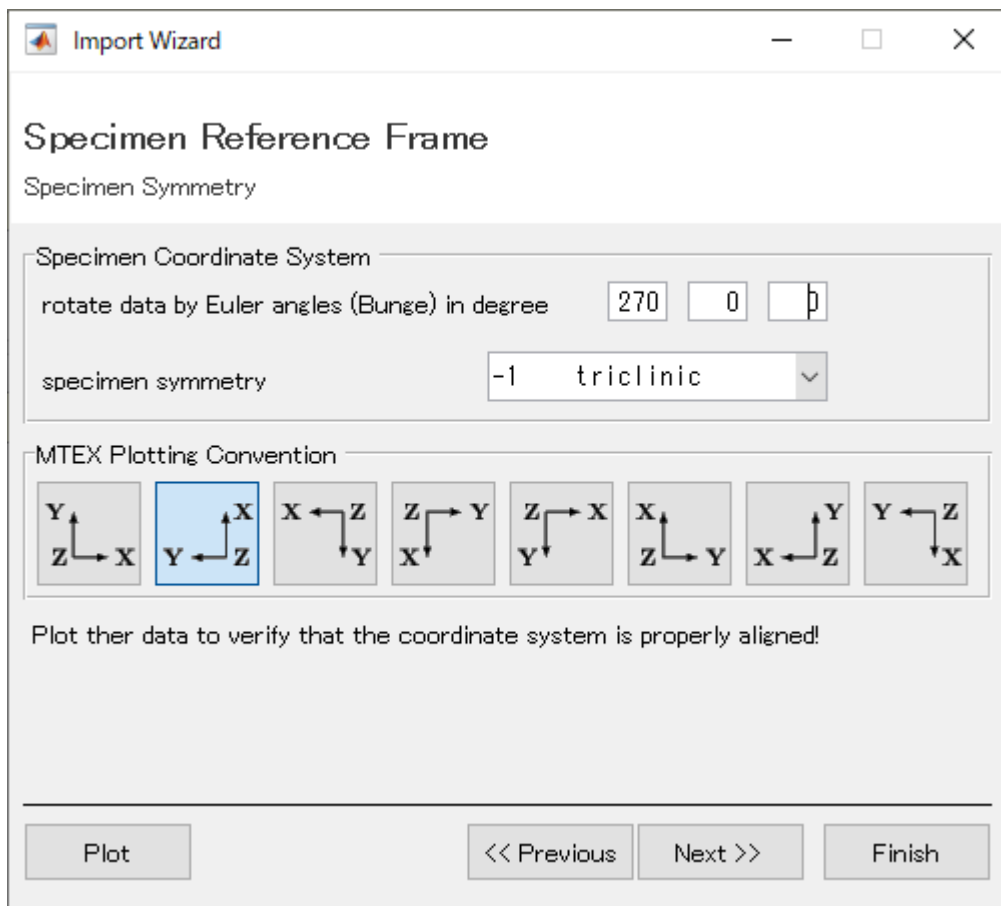
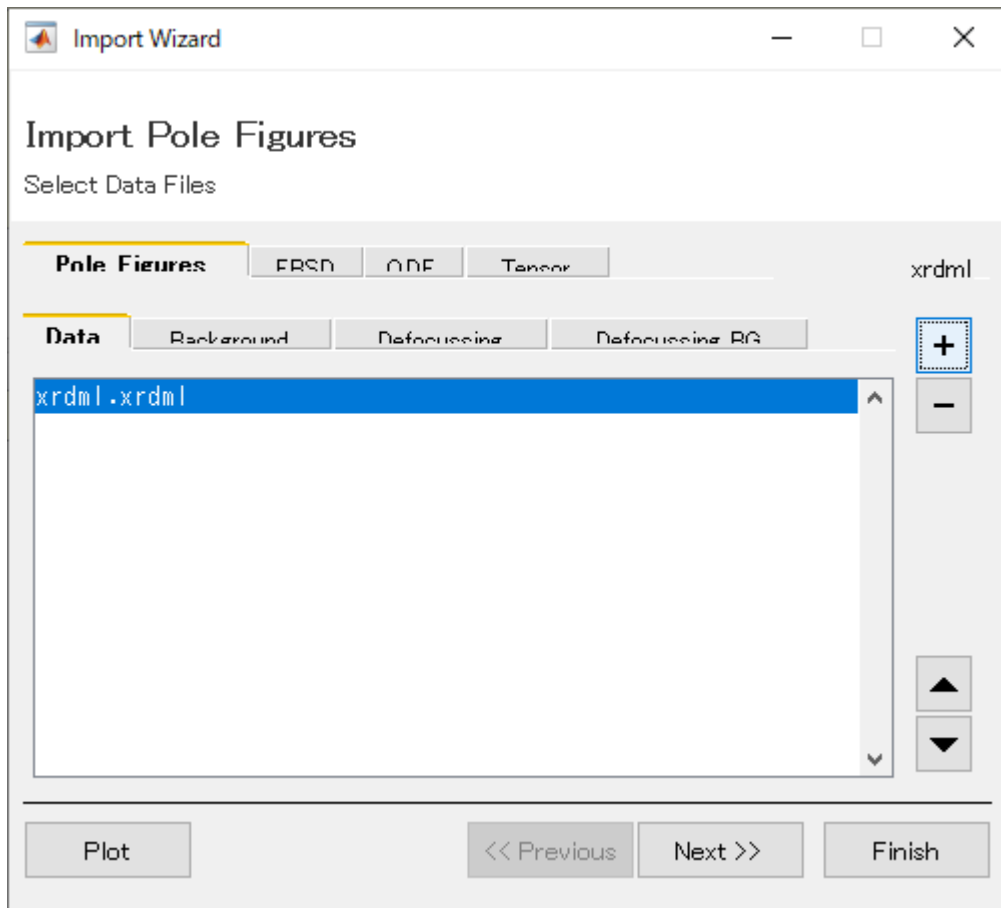
4. x r d m l データを直接、X 軸上として読み込む





ODF が 90 度回転している。

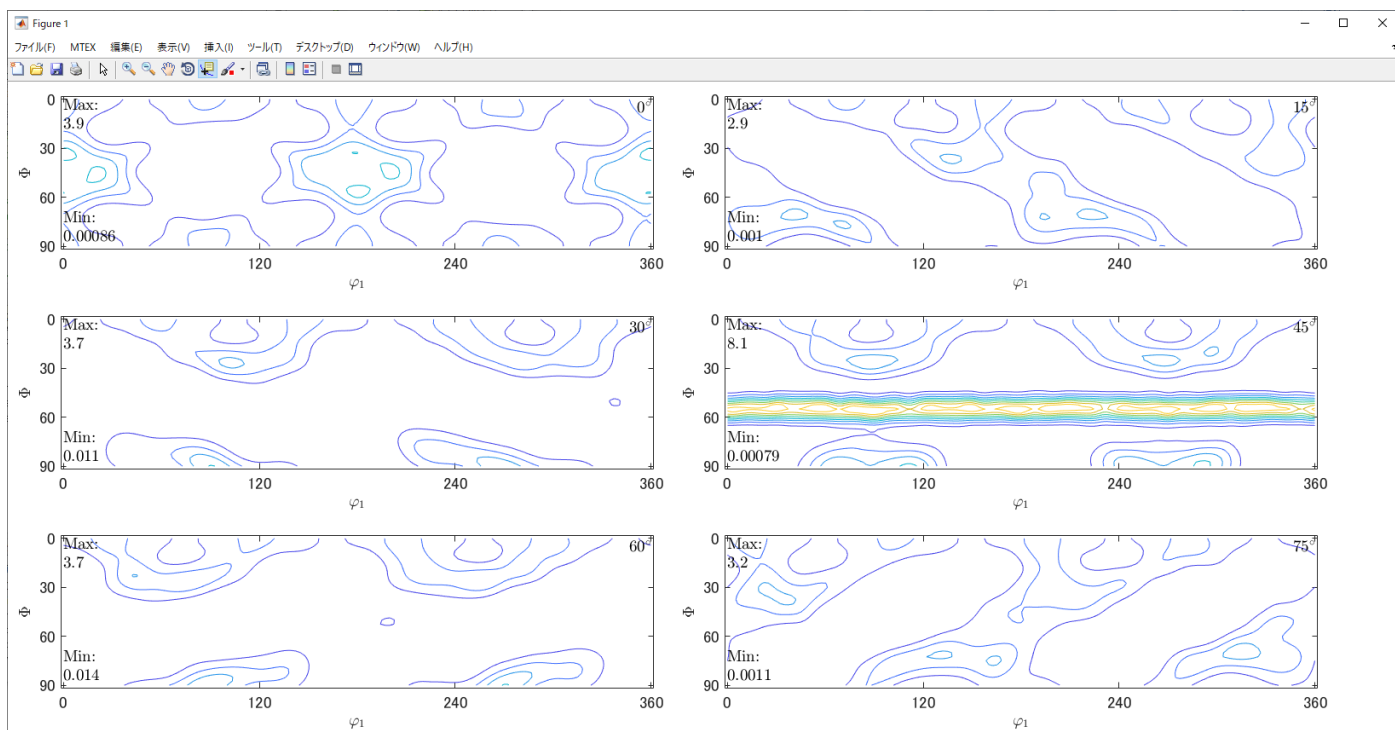
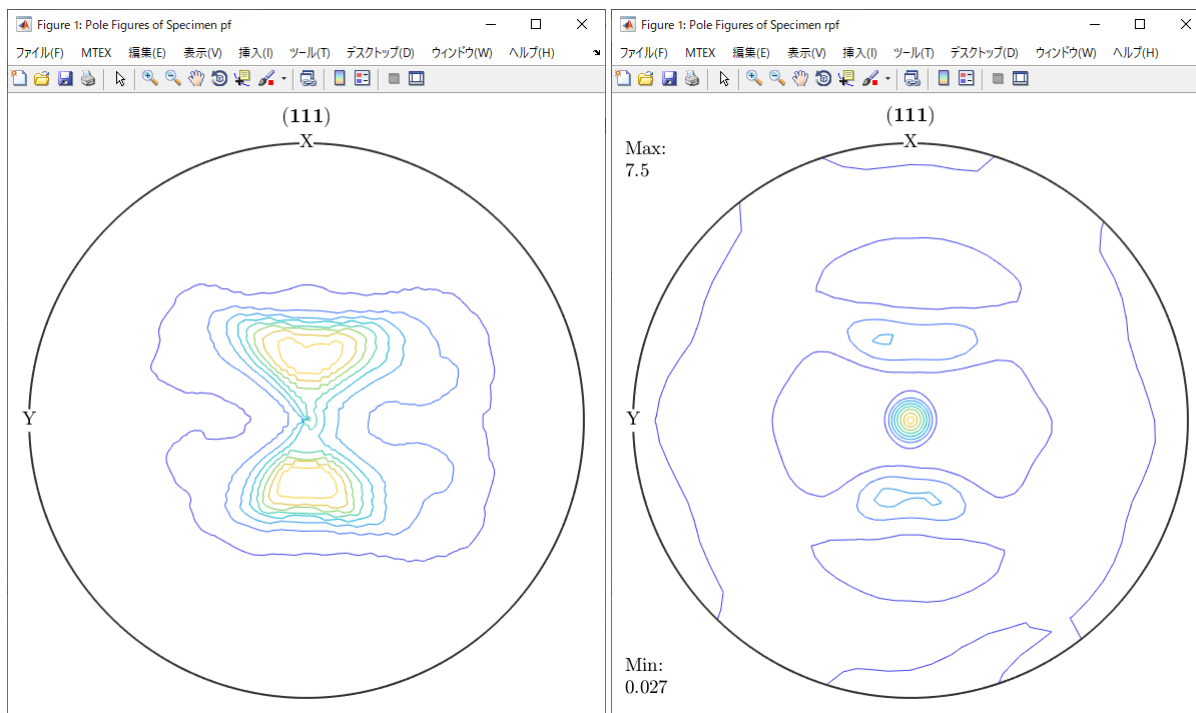
5. xrdml データを直接、X 軸右として読み込み Bunge 回転を行う



`plot(rpf,'contour','projection','stereo')`

ND回転を行い、読み込み

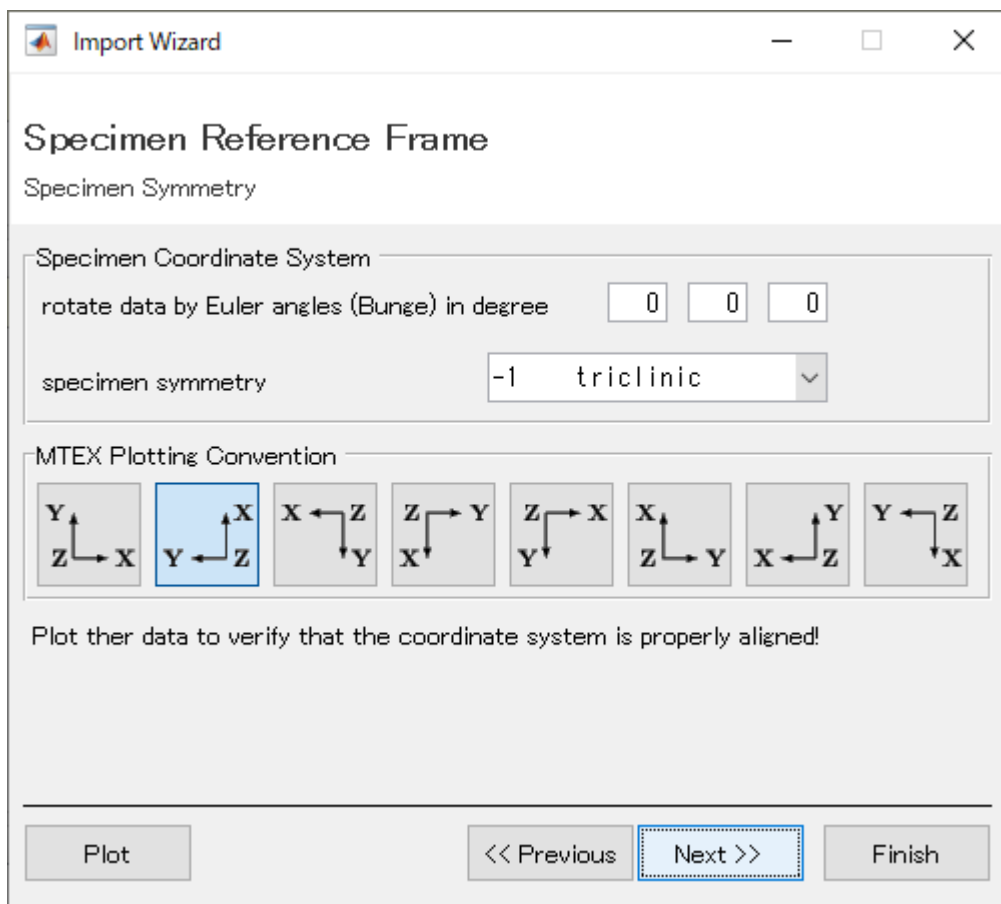
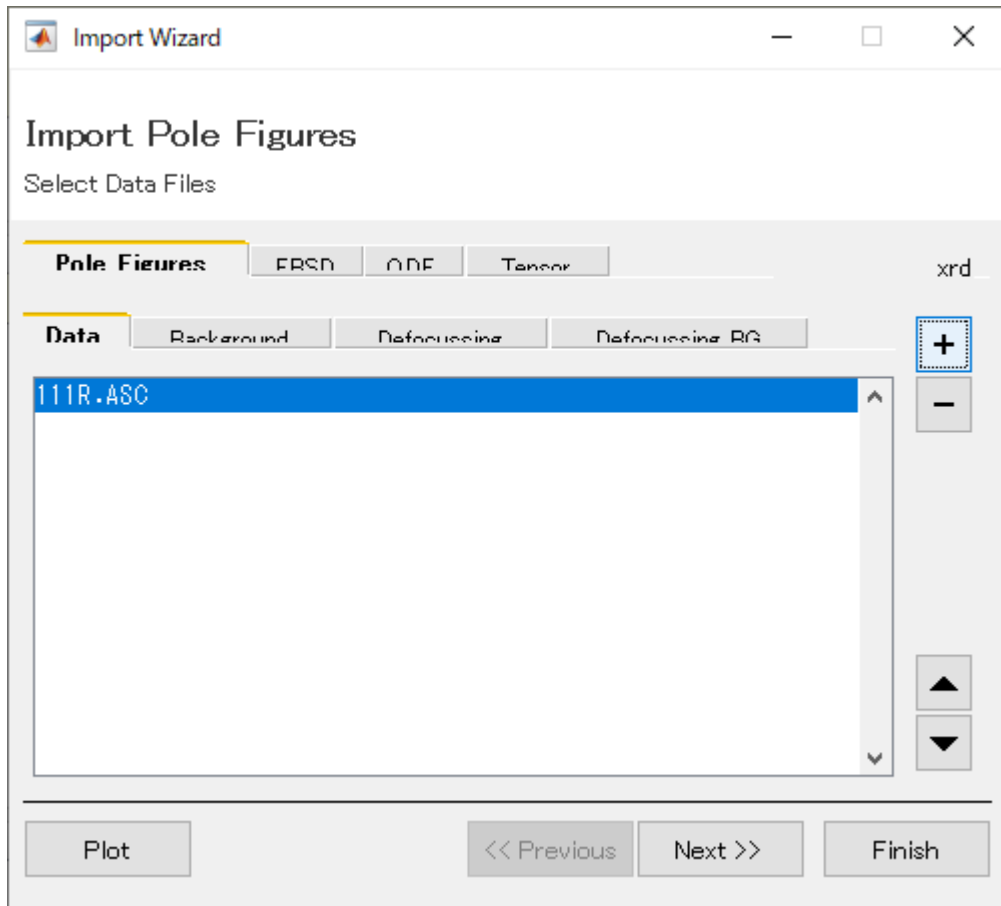
再計算極点図



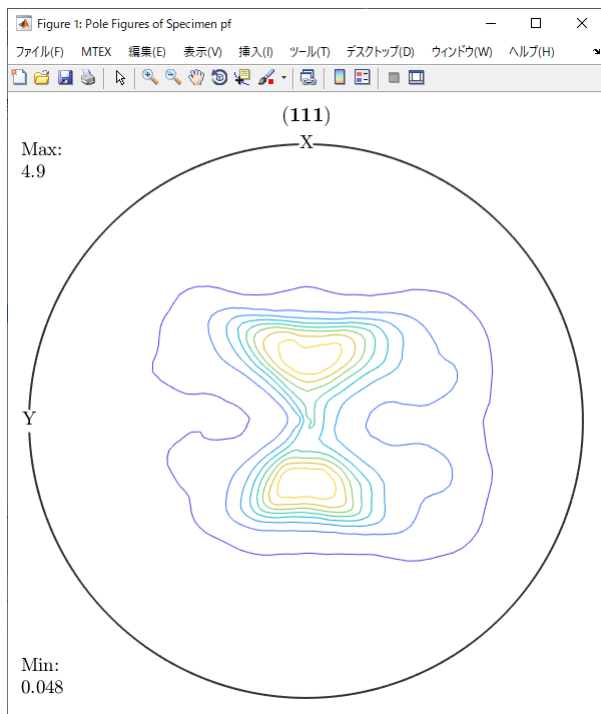
2. 一般的なMT E X解析 (CCW) と同じ解析が出来ました。

残るはD e f o c u sの問題です。

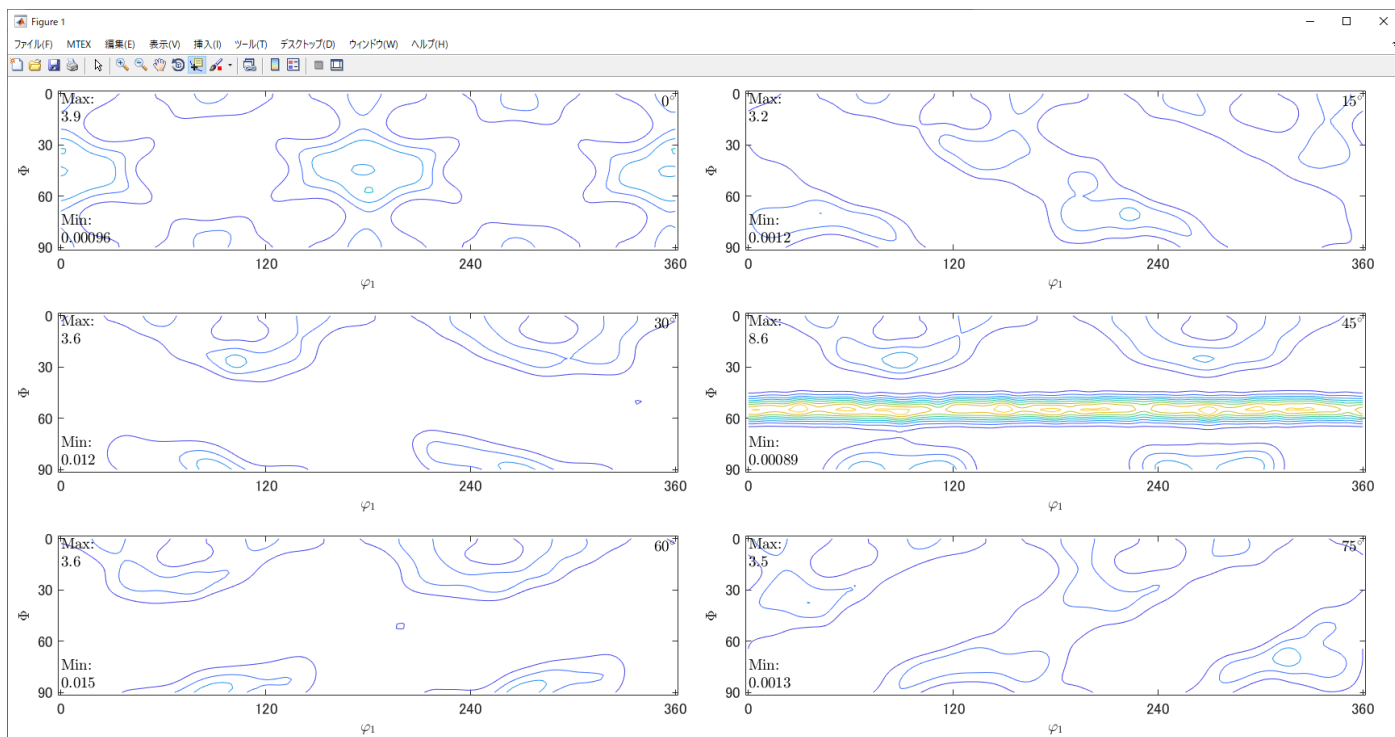
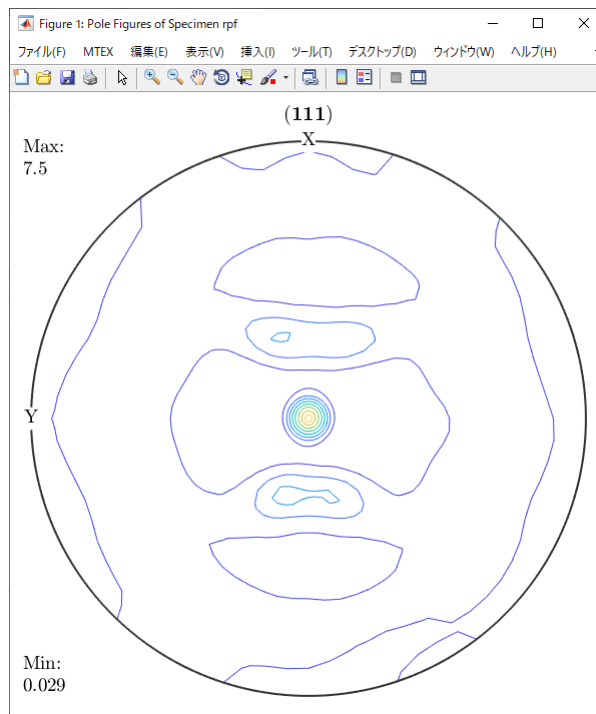
6. `defocus`を解決する。
2の一般系データを用いる



入力データ

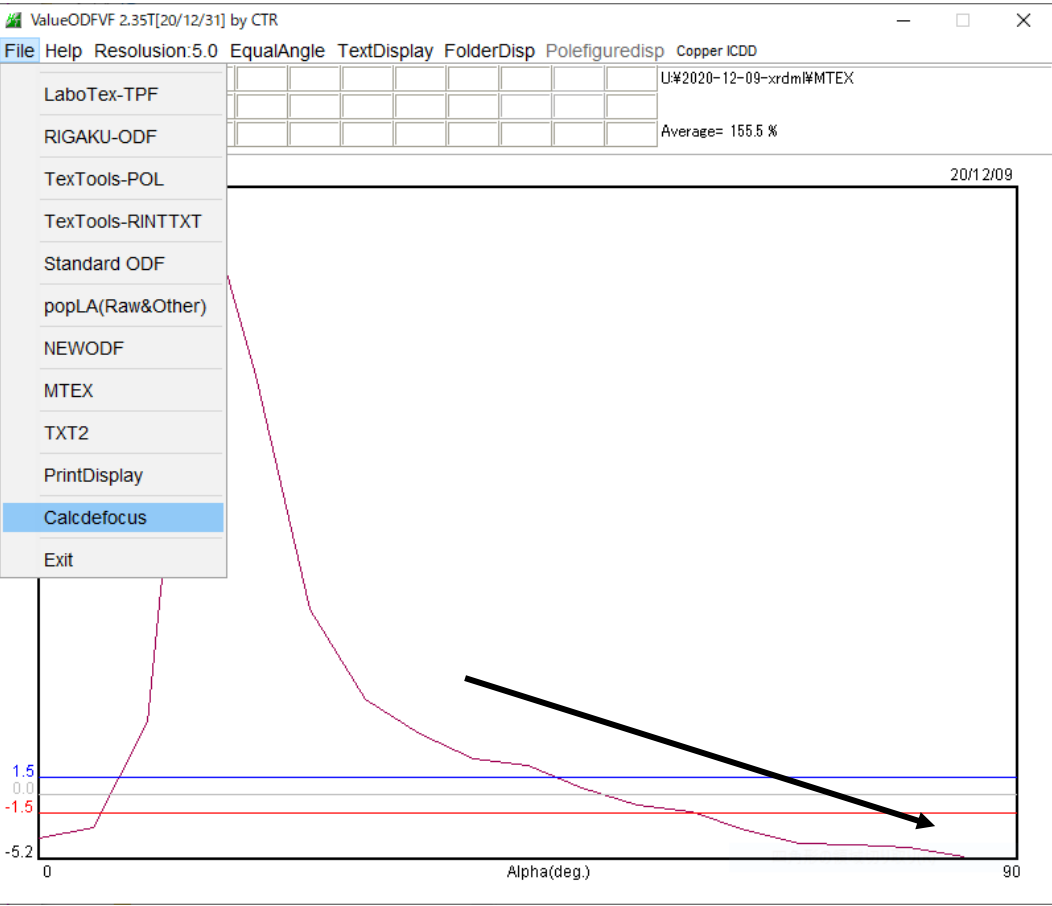


再計算極点図

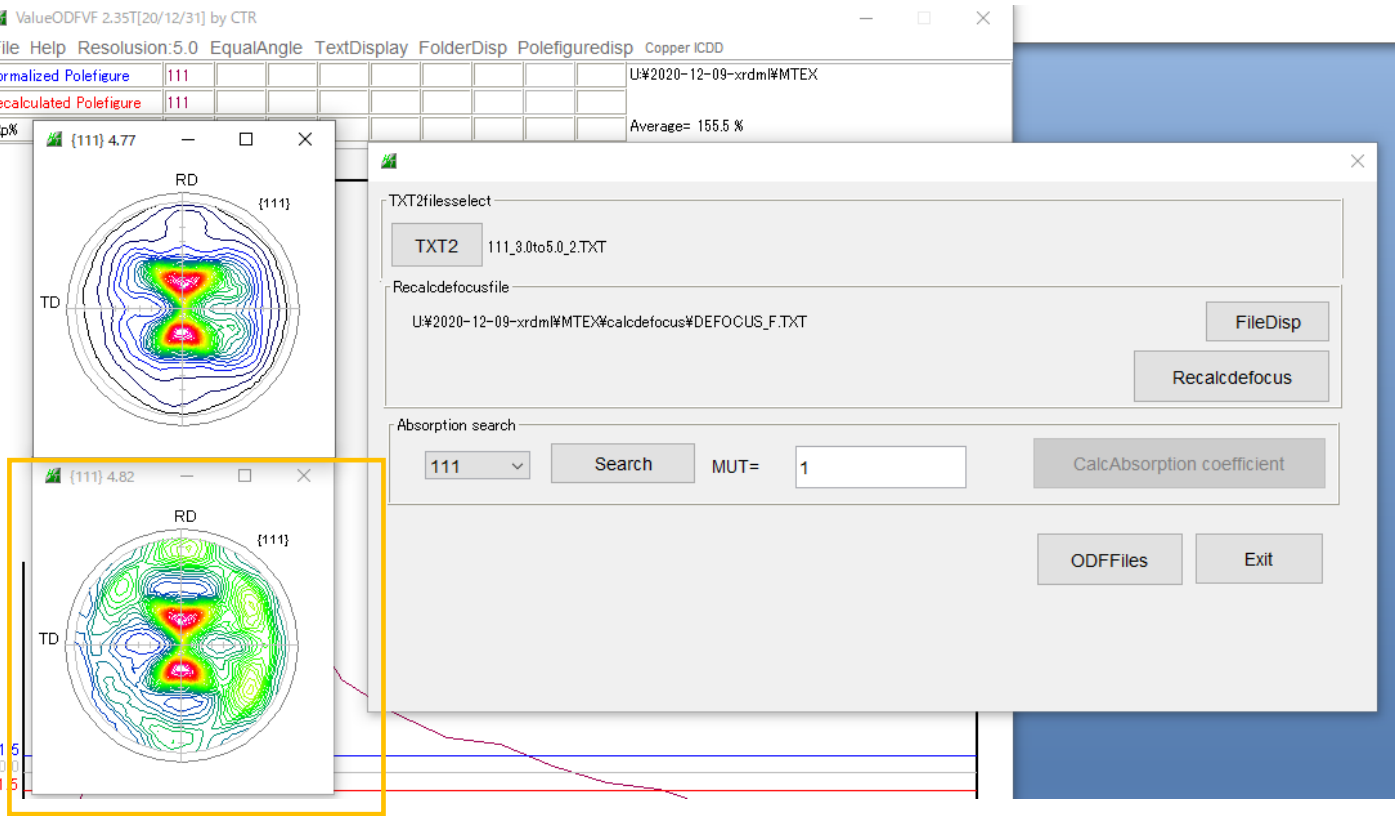


再計算極点図と入力データから `defocus` を計算する

6. 1 d e f o c u s 評価



defocus の影響



d e f o c u s 補正を行った入力データ
このデータをM T E X で解析を行う。

PF to MTEX by CTR PFtoODF3 8.47T[20/12/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material: Copper.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenflies): 7 - O (cubic)

a: 1.0 <= b: 1.0 <= c: 1.0 alpha: 90.0 beta: 90.0 gamma: 90.0

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111_3.0to5.0_2.TXT	1,1,1	0	0.0->85.0	0.0	85.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	1,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input 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: 111_3.0to5.0_2.TXT

Symmetric type: Full

Center Data: ☒ Average

Asc(CCW) file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename: ASC

Import Wizard

Import Pole Figures

Select Data Files

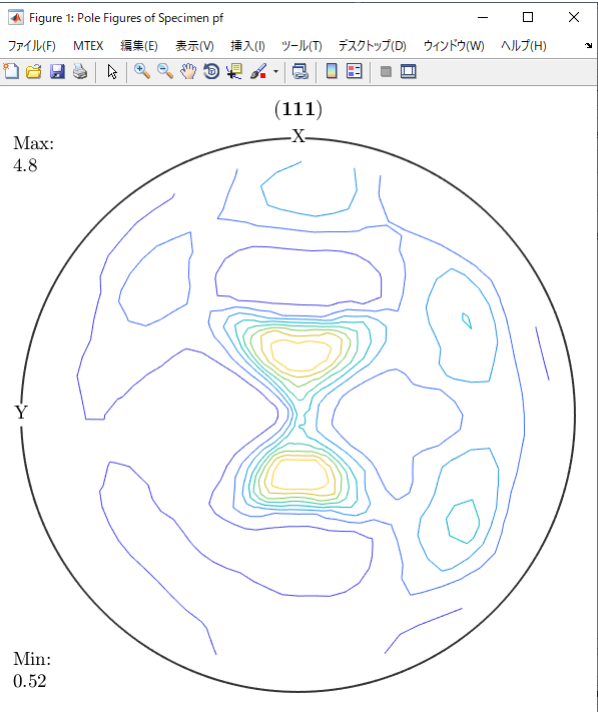
Pole Figures: FRSD ODF Tensor

Data: Background Defocussing Defocussing BG

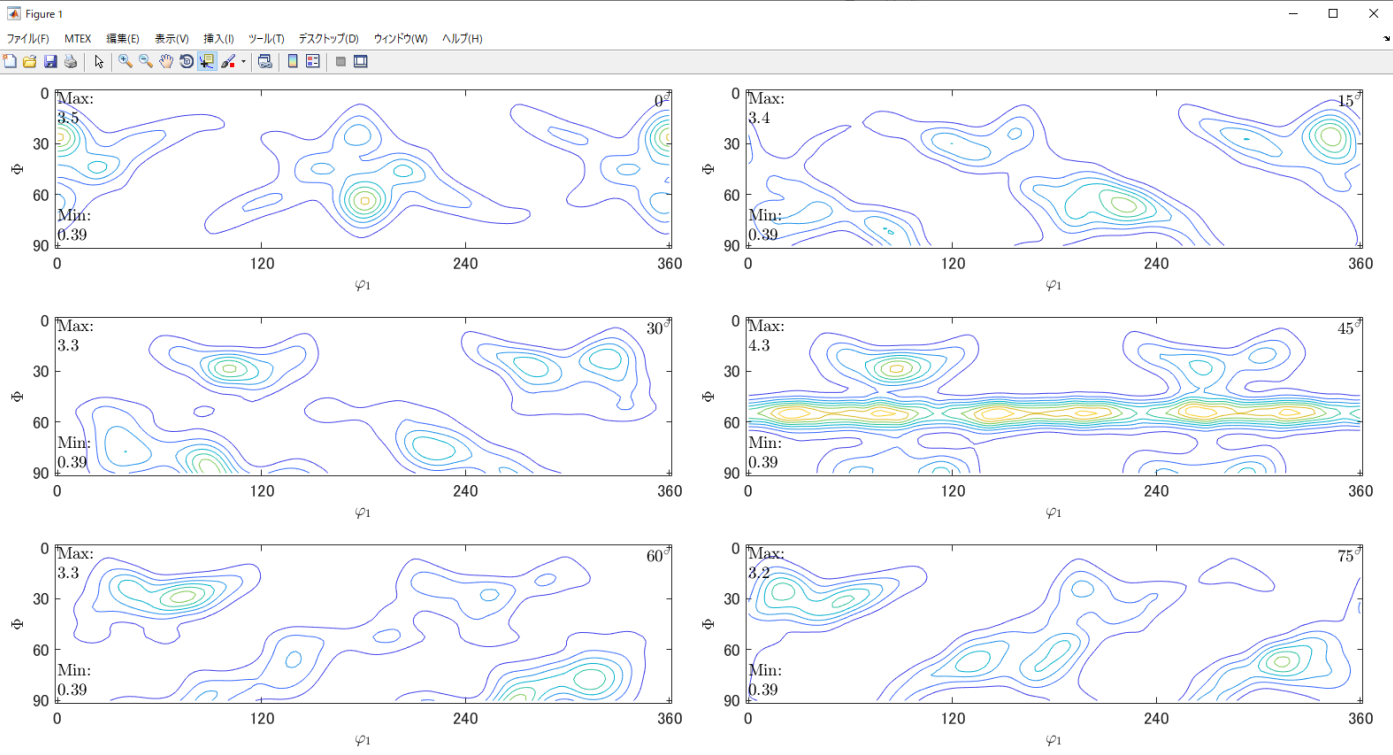
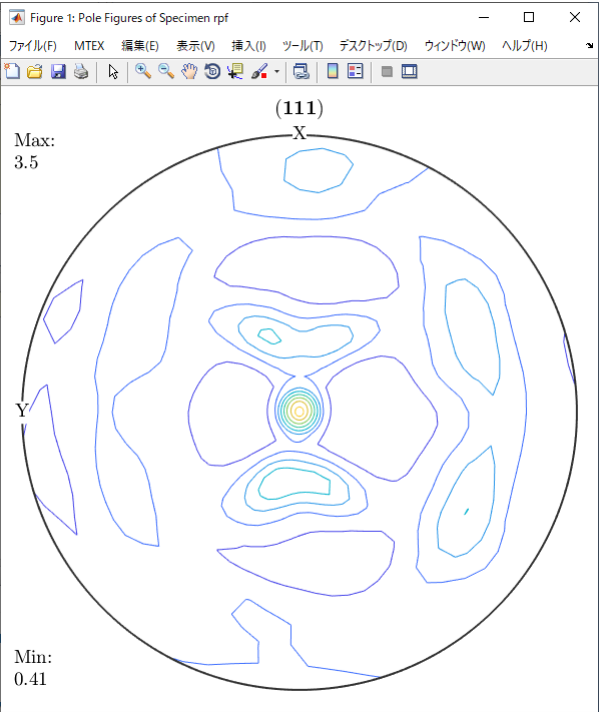
111R.ASC

Plot << Previous Next >> Finish

defocus 補正後の入力極点図

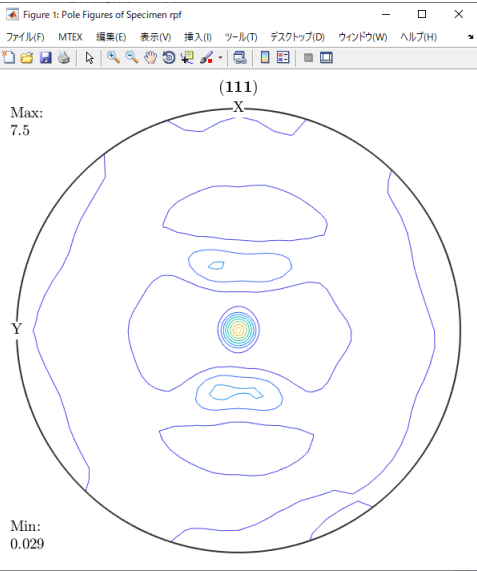


再計算極点図

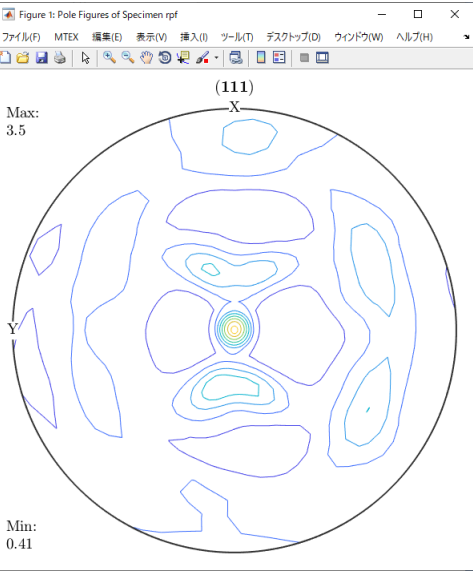


6. 2 defocusありなしを図で比較

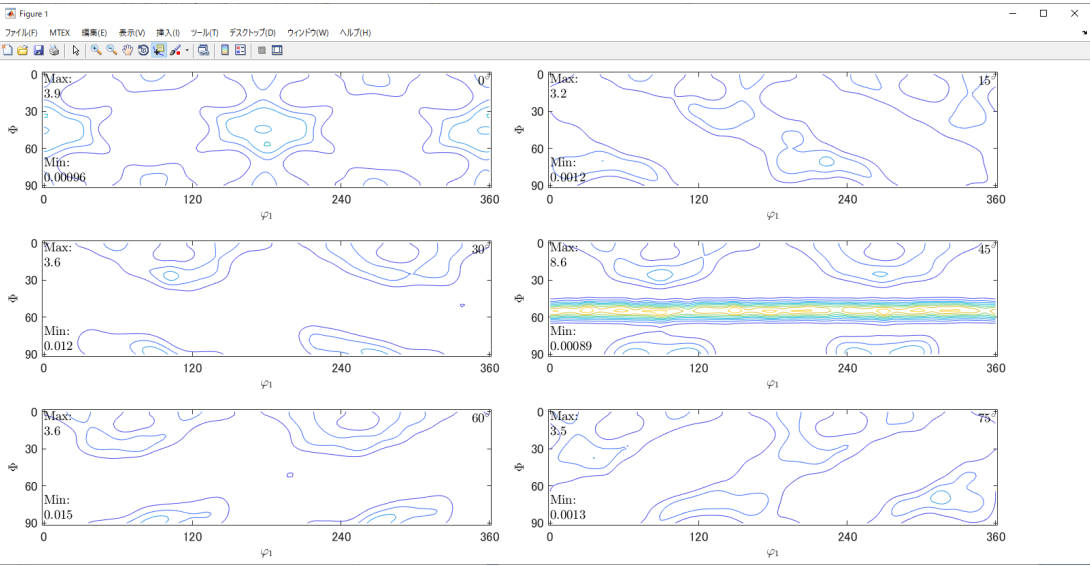
defocusなし



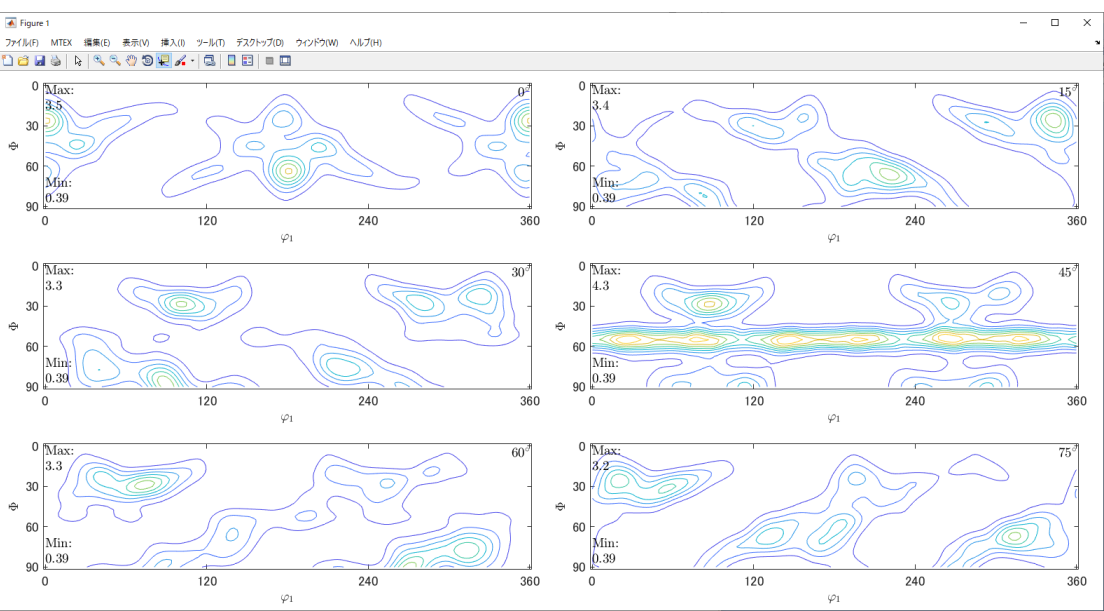
defocusあり



defocusなし

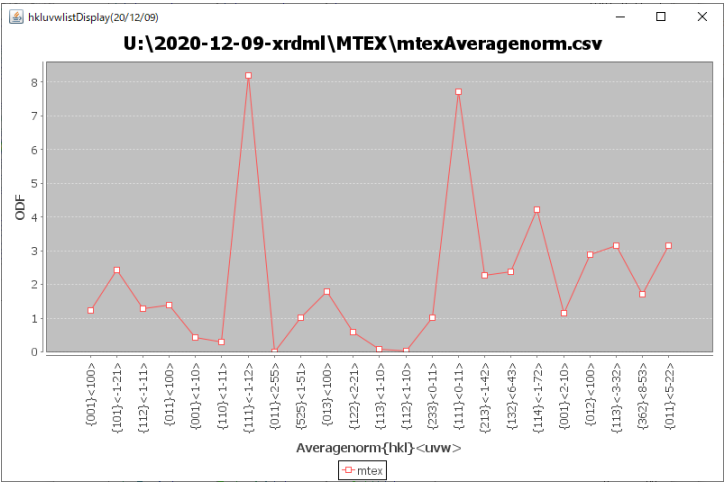
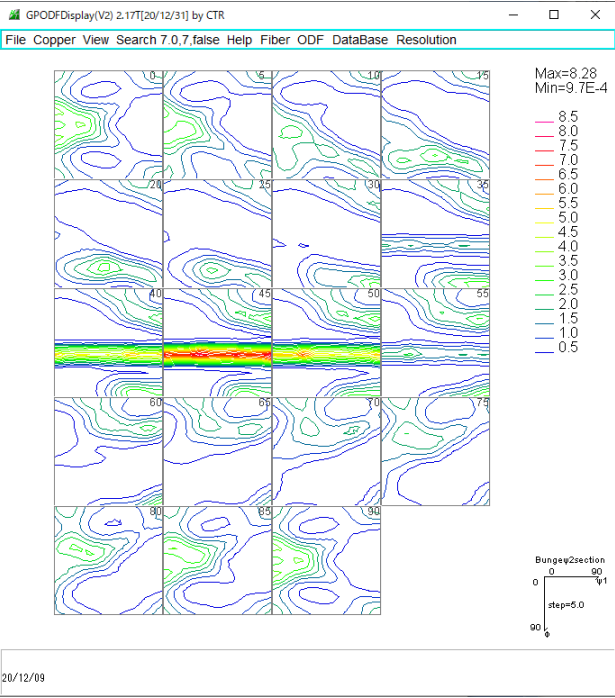


defocusあり

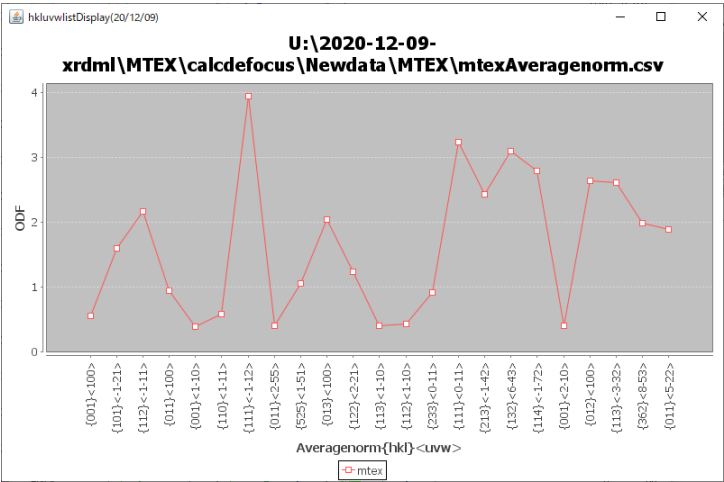
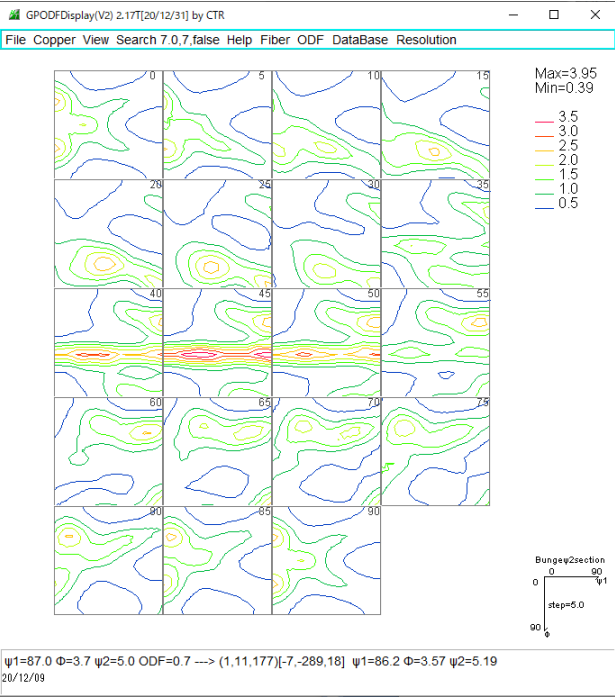


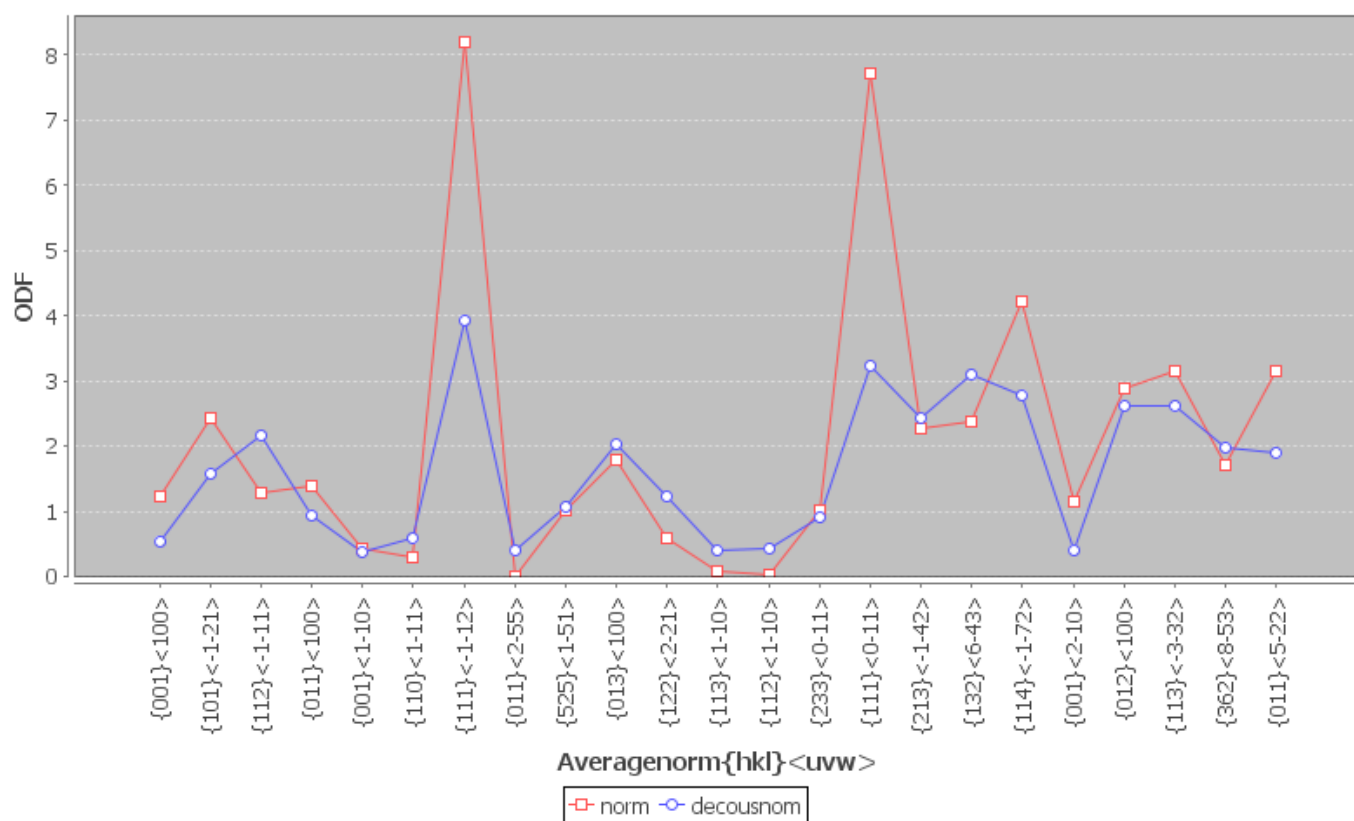
補正有り無しで大きく異なった結果になります。

6. 3 ODF 図から方位分布評価
補正なし



補正あり









xrdml-defocus

6. 4 β -F i b e r 比較

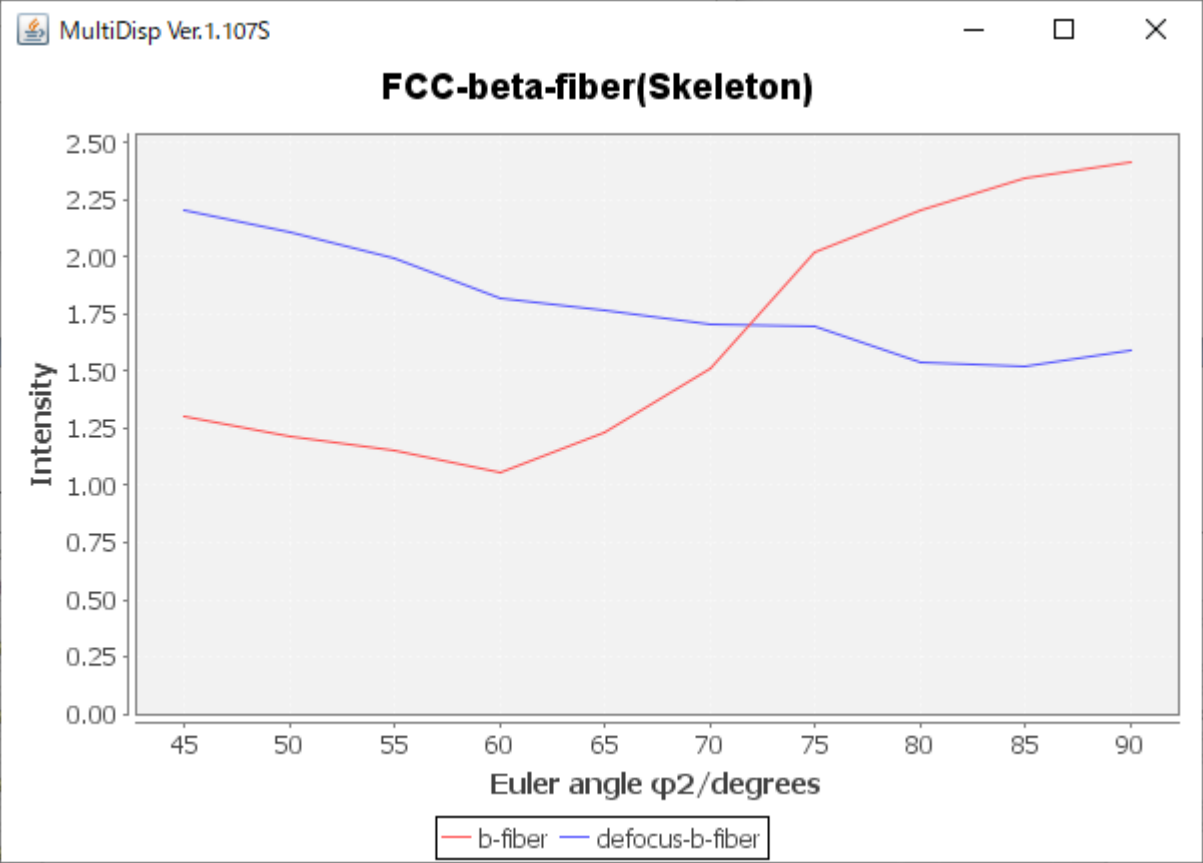
FiberMultiDisplay 1.03ST[20/12/31] by CTR

File Help

	U:\2020-12-09-xrdml\MTEX\FIBER\FCC-beta-fiber-ODFSMOFF-SMOFF.TXT	<input checked="" type="radio"/> Dispselect	DispTitle b-fiber
	U:\2020-12-09-xrdml\MTEX\calcdefocus\Newdata\MTEX\FIBER\FCC-beta-fiber-ODFSMOFF-SMOFF.TXT	<input checked="" type="radio"/> Dispselect	DispTitle defocus-b-fiber
		<input type="radio"/> Dispselect	DispTitle NO 3
		<input type="radio"/> Dispselect	DispTitle NO 4
		<input type="radio"/> Dispselect	DispTitle NO 5
		<input type="radio"/> Dispselect	DispTitle NO 6

Main Title FCC-beta-fiber(Skeleton)

Display



7. まとめ

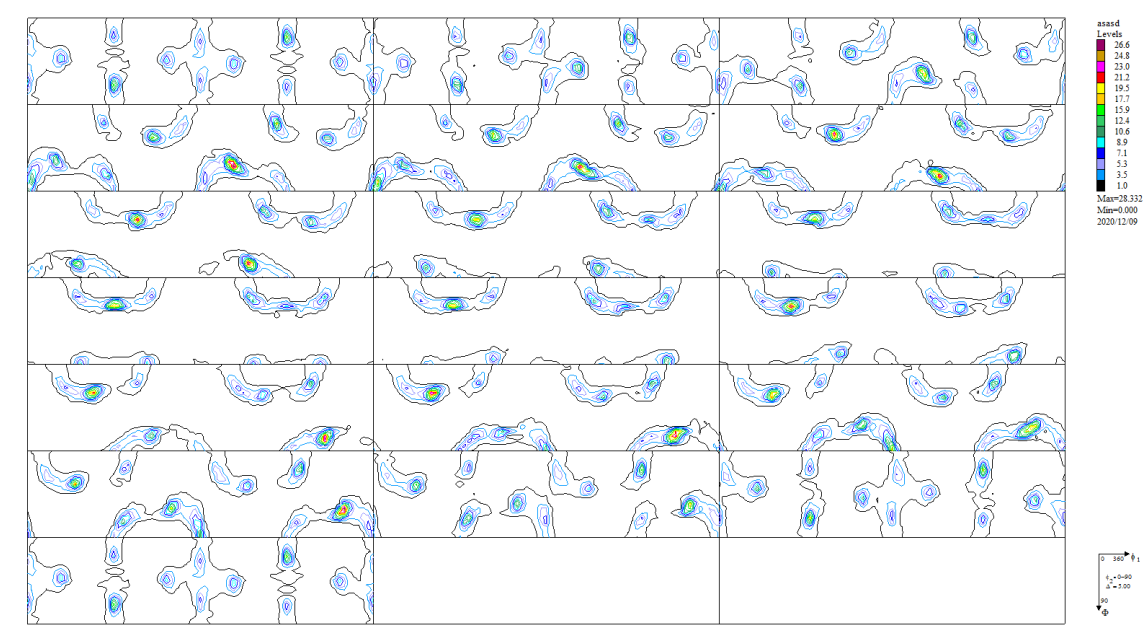
x r d m l データを M T E X で解析を行う場合、e u l e r 角度 ($\phi 1$, Φ , $\phi 2$) とした場合
(270, 0, 0) 回転を行って読み込む

あるいは、A S C 変換して A S C データとして読み込む

d e f o c u s データがない場合、入力極点図と O D F 解析後の再計算極点図から

d e f o c u s 曲線を作成し、入力データの d e f o c u s 補正を行って再度 O D F 解析を行うと
良好な結果が得られる。

アルミニウムの H 材の O D F 解析結果



2. 一般的な M T E X 解析 (C C W) に似た O D F 図です。