

MTEXソフトウェアをサポートするCTRソフトウェア

XRD, EBSDデータを扱う

2021年01月26日

HelperTex Office

1. 概要
2. 各社XRDデータ
 2. 1 R i g a k u社データ
 2. 2 P A N a l y t i c a l社データ
 2. 3 B r u k e r社データ
3. 極点処理
 3. 1 バックグラウンド処理
 3. 2 吸収補正
 3. 3 d e f o c u s補正
 3. 3. 1 d e f o c u s補正なし
 3. 3. 2 内部 d e f o c u s補正曲線作成し補正
 3. 3. 3 実測定 r a n d o mデータによる補正
 3. 3. 4 d e f o c u s補正なし+再計算R p%
 3. 3. 5 内部 d e f o c u s補正曲線作成し補正+再計算R p%
 3. 3. 6 実測定 r a n d o mデータによる補正+再計算R p%
4. 平滑化
5. 処理後のデータE x p o r t
6. 各種ODFデータフォーマット変換
7. XRDデータをMTEXに読み込み
8. E x p o r tした再計算極点図からR p%を計算
9. E x p o r tしたODF図を1/4対称操作、方位計算
10. E x p o r tした逆極点図から方位計算
11. EBSDデータ
12. f e r r i t e . a n gをf e r r i t e . c t fに変換しMTEXに読み込む
13. MTEXでf e r r i t e . c t fの処理
 13. 1 E x p o r tしたODFから方位計算
 13. 2 E x p o r tした逆極点図から方位計算

1. 概要

MTEXは、MATLAB環境下で動作するFreeのXRD、EBSDデータの解析ソフトウェアである。入力データは各社フォーマットを読み込める。

XRDデータの場合、MTEX内部で極点補正であるバックグラウンド除去、defocus補正を行うことも可能であるが、予め処理を行って読み込ませる。EBSDデータは、各社データを読み込むが、ローダ部分で解釈され、不一致の場合、GenericInterfaceに誘導され、テキストデータの列編集が行われが、操作性が悪い。

XRD、EBSDを読み込むとODF解析が行われる。解析結果の描画に重点が置かれていて、数値的な方位解析は行われていない。

このような状況下で、

- XRD各社データの極点処理

- EBSD各社データの先頭にある情報編集

MTEXでODF解析結果のODF図、極点図、逆極点図の数値解析をCTRソフトウェアでサポートしています。

本資料では、MTEX向けCTRソフトウェアの機能説明を行います。

2. 各社XRDデータ

テキストデータであればどのようなフォーマットでも変換は可能

2. 1 R i g a k u社データ

CTRソフトウェアでは、R i g a k uのA S C I Iデータを基本データとしています。

A S C I IデータにはA S C I I - P C , A S C - H P , A S C - R A P I Dの3種類あり、極点処理プログラムO D F P o l e F i g u r eソフトウェアで読み込み時、A S C I I - P Cに変換され処理が行われます。

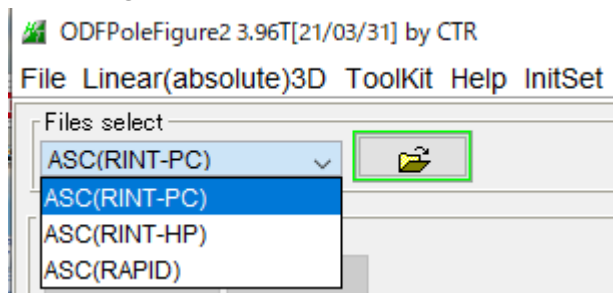
A S C I Iデータには、透過データと反射データが1つのファイルとして測定されたデータがあるが、別ファイルに加工され、極点処理後、データの接続が行われます。

又、S m a r t L a b用フォーマットであるr a sファイルはA S C I I - P Cデータに変換します。

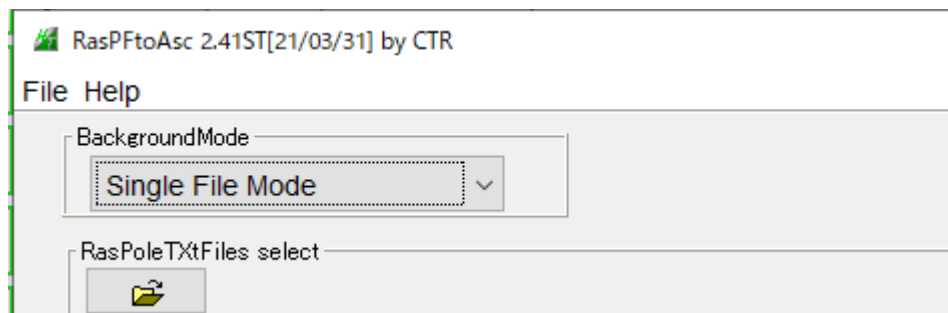
S m a r t L a bは発売時、ピーク極点図とバックグラウンドは別ファイルとして測定されていた。

このデータもA S C I I - P Cデータに変換を行う。

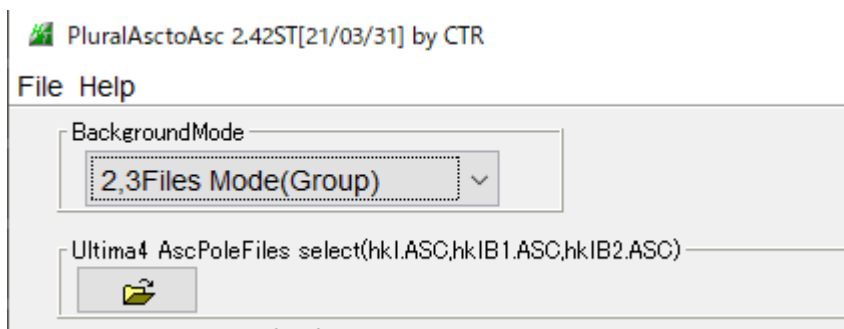
ODFPoleFigure2によるデータ変換部



RastoAscによるRasファイルをASCII-PCに変換



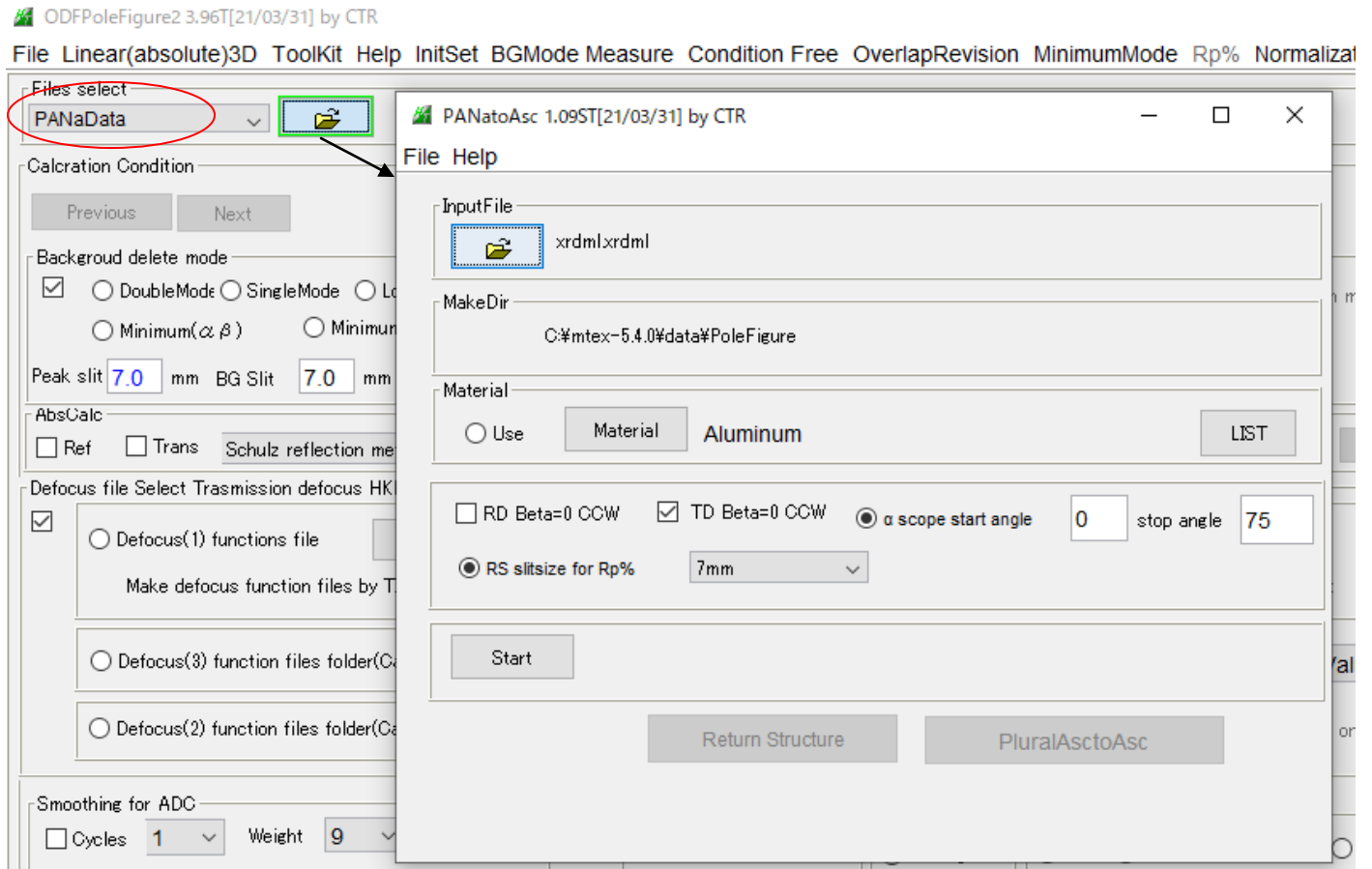
ピーク極点図とバックグラウンド極点図からASCII-PC形式に変換



2. 2 P A N a l y t i c a l 社データ

CTR作成時、データフォーマットは、t x t と c s v であったか、x r d m l ファイルが追加されたピーク極点図とバックグラウンド極点図が別のデータも存在している。

ODFPoleFigure2 によるデータ変換部 (t x t , c s v を扱う)



データ変換部を使用して ASCII-PC データを得る

変換に利用したデータ

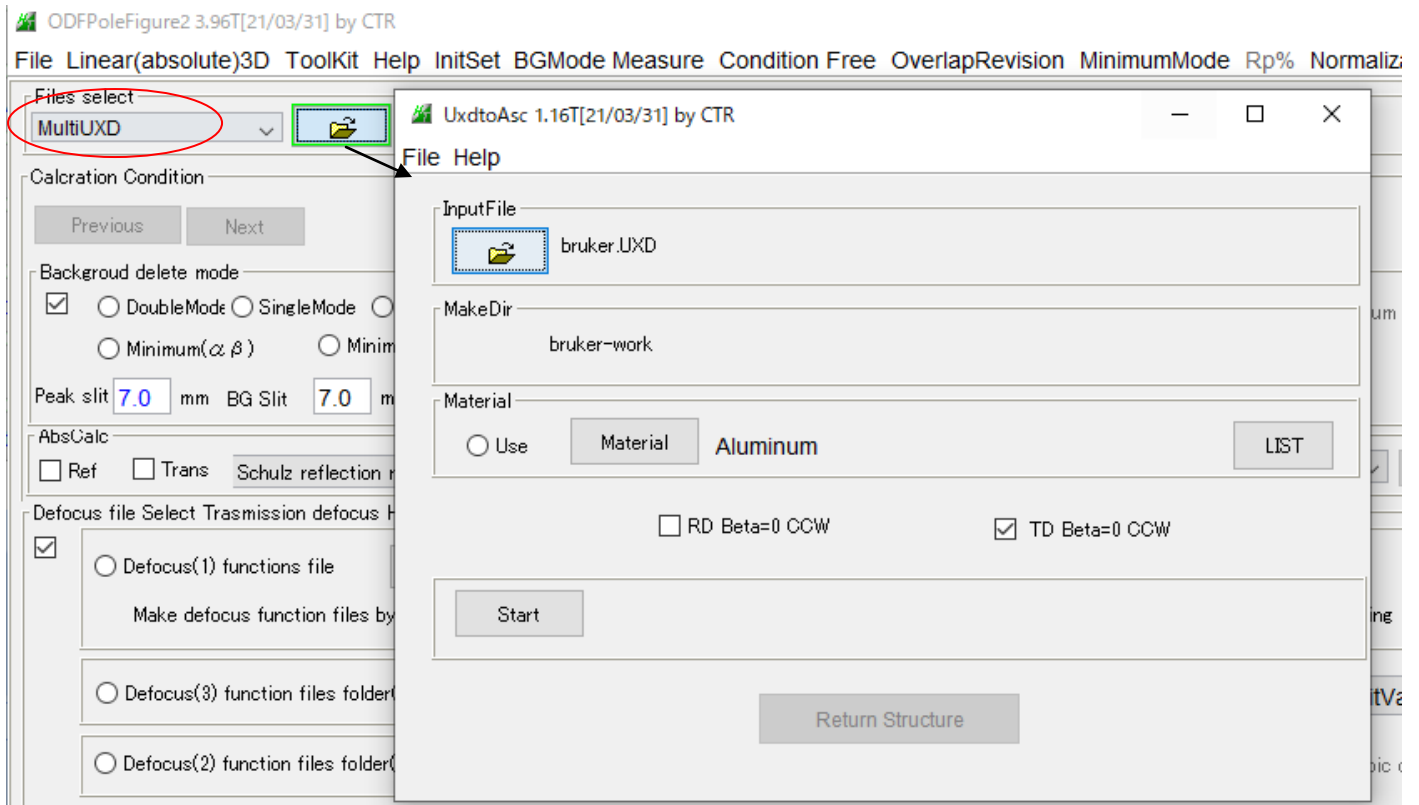
Mtex-1.1\data\philips

NiR-700-111.txt	42 KB	テキスト文書
NiR-700-200.txt	46 KB	テキスト文書
NiR-700-220.txt	42 KB	テキスト文書

Mtex-3.0\data\PoleFigureData

philips-111.txt	261 KB	テキスト文書
xrdml.xrdml	71 KB	XRDML ファイル

2. 3 B r u k e r社データ



データ変換部を使用して ASCII-PC データを得る

```

COUNTS
489      503      506      476      479      484      449      442      495      461
500      483      485      516      532      498      522      551      540      589
562      547      537      554      523      513      529      523      555      530
521      546      502      505      491      521      566      529      543      544
548      550      557      565      558      561      617      602      555      577
532      558      530      602      627      581      574      561      574      586
557      577      543      505      548      501      518      529      525      503
502      502
  
```

3. 極点処理

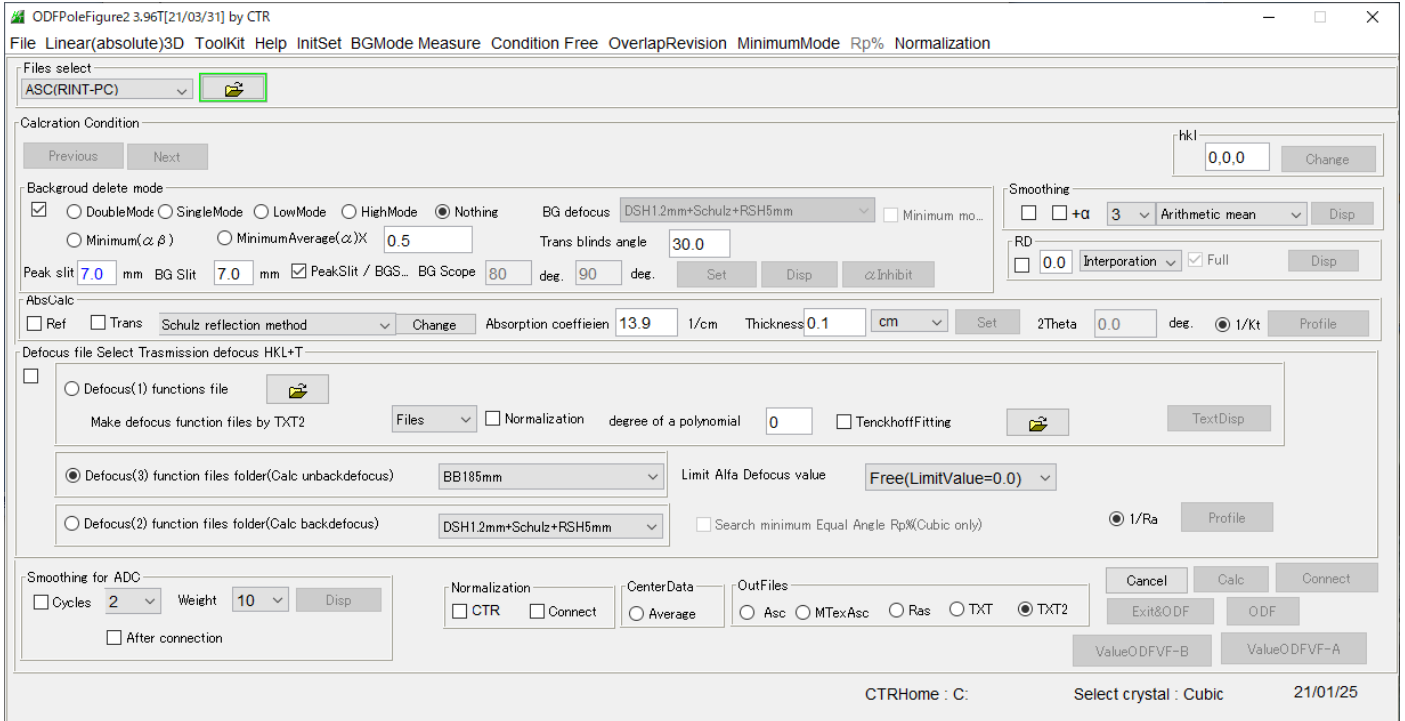
測定データには、各種Errorが存在します。

データの凸凹、バックグラウンドの凸凹、defocus、defocusの凸凹、吸収補正值のずれなど、多数のerror要素があります。

これらを排除した極点処理が必要になります。

たとえば、バックグラウンドに凸凹があると、 β 方向に広がり、fiber要素が発生します。

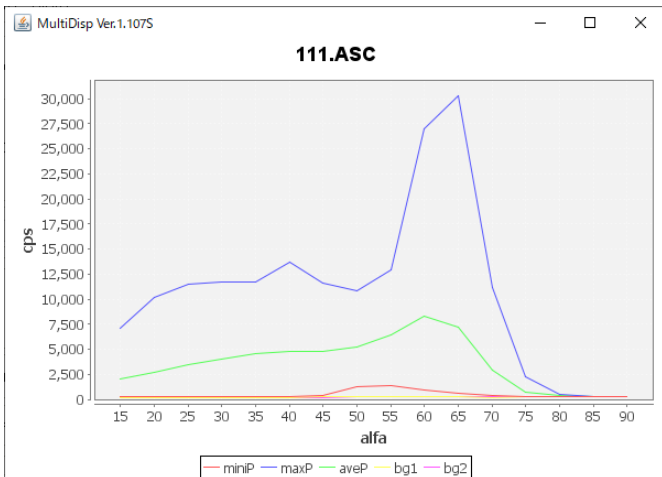
defocusも同様です。このErrorがODF解析時のRp%Errorとして評価されます。最小のRp%が得られる極点処理が望まれます。



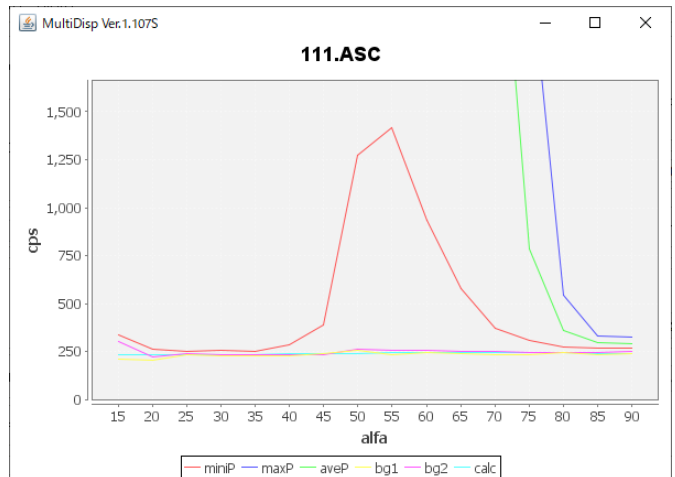
3. 1 バックグラウンド処理

バックグラウンドの強度は低い為、統計変動の影響を受けます。データの確認が必要です。

プロファイル確認

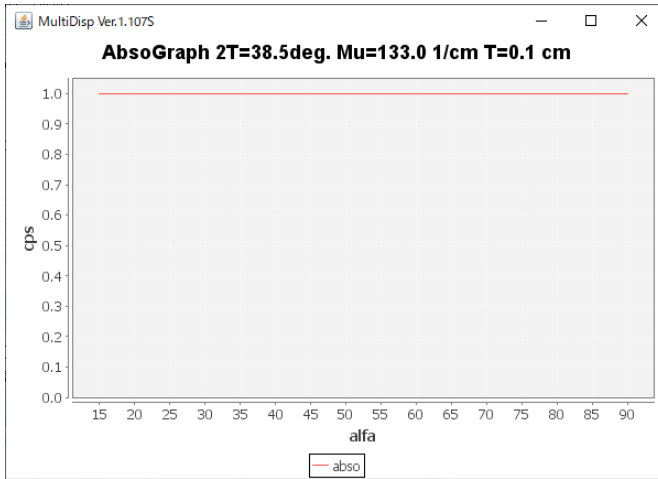


バックグラウンド凸凹修正 calc (水色)



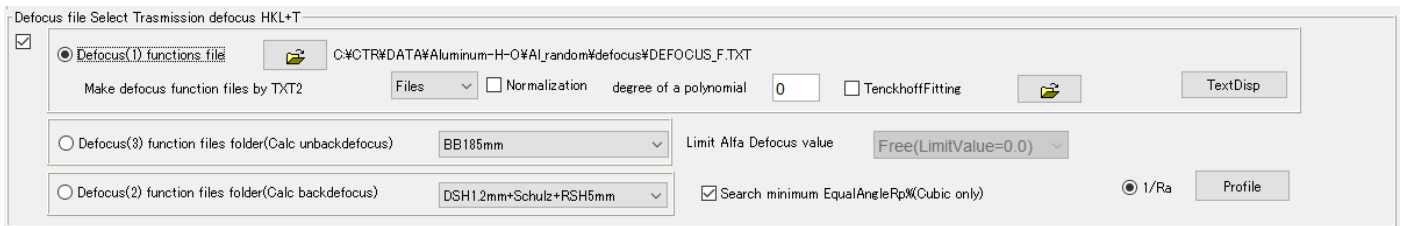
3. 2 吸収補正

材料が薄い場合、補正が必要になります。プロファイルで確認

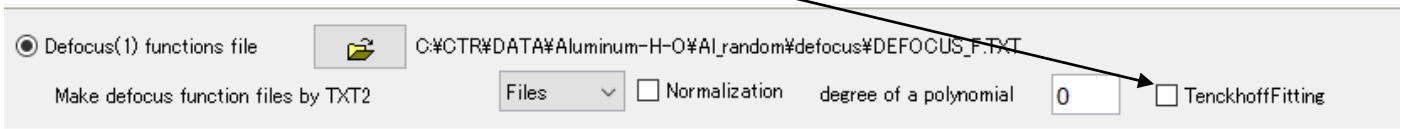


3. 3 d e f o c u s 補正

各種補正方法のサポート

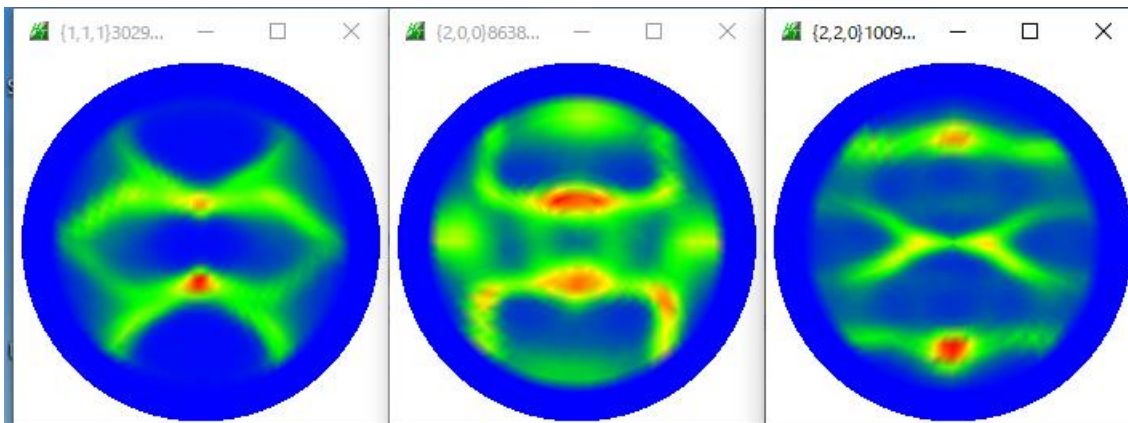


補正プロファイル作成時、平滑化（理論曲線に F i t t i n g を行うことで凸凹が解消されます）



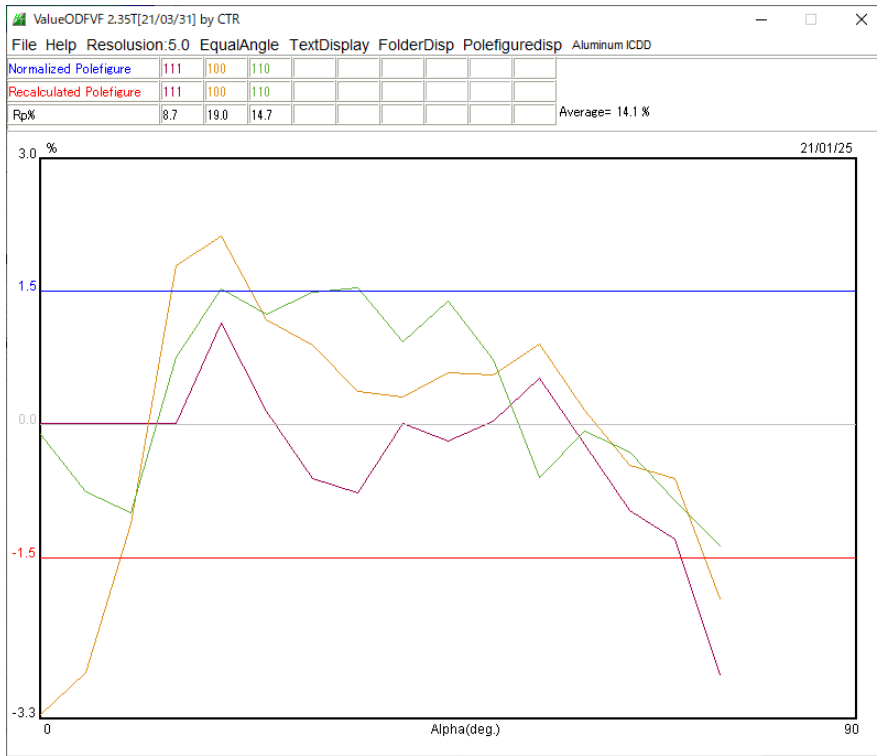
d e f o c u s 補正モード

- d e f o c u s 補正なし
- 内部 d e f o c u s 補正曲線作成し補正
- 実測定 r a n d o m データによる補正
- d e f o c u s 補正なし+再計算 R p %
- 内部 d e f o c u s 補正曲線作成し補正+再計算 R p %
- 実測定 r a n d o m データによる補正+再計算 R p %



上記データで比較を行ってみます。

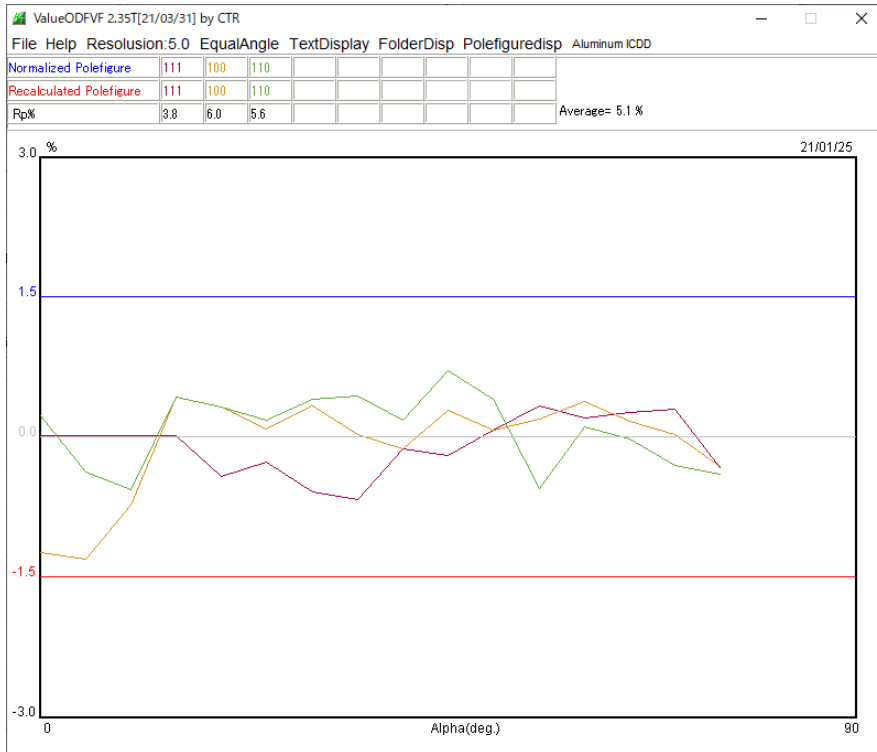
3. 3. 1 d e f o c u s 補正なし



Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	8.7	19.0	14.7

Average= 14.1 %

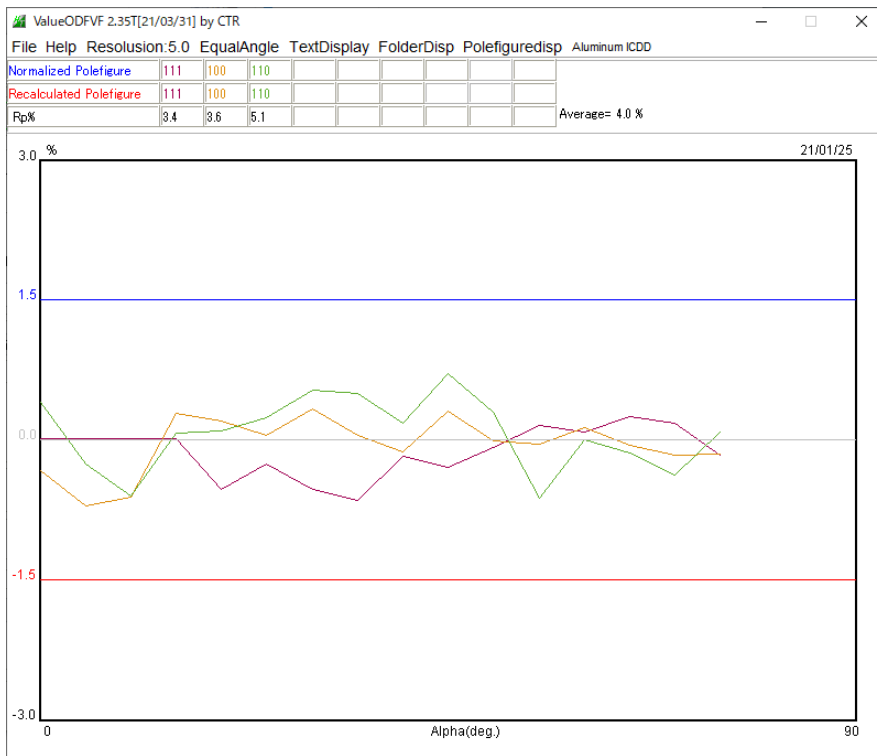
3. 3. 2 内部 d e f o c u s 補正曲線作成し補正



Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	3.8	6.0	5.6

Average= 5.1 %

3. 3. 3 実測定 randomデータによる補正

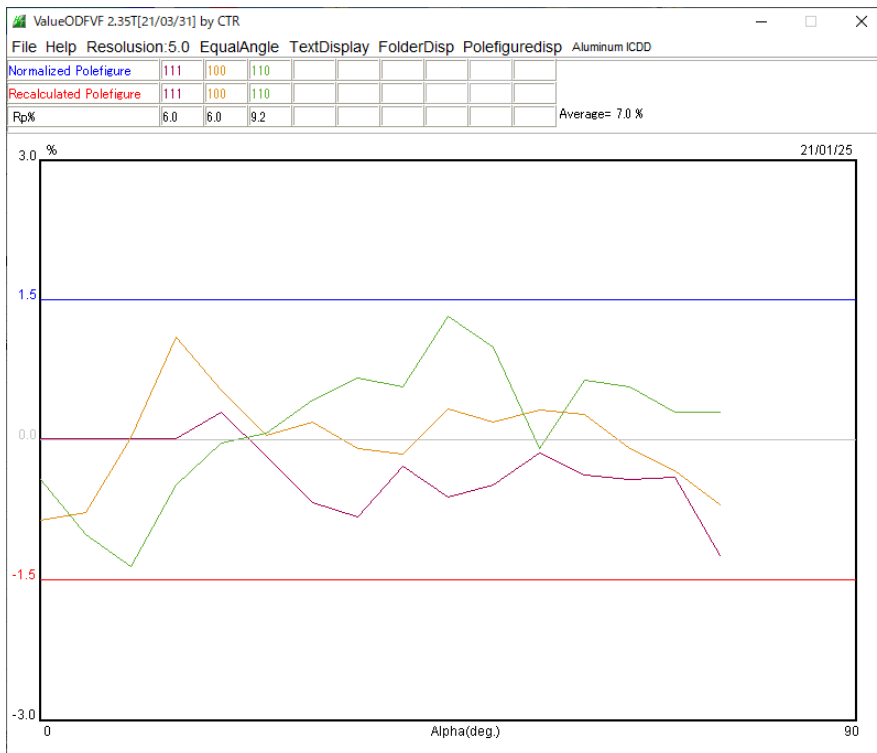


Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	3.4	3.6	5.1

Average= 4.0 %

最小なRp%が得られた。

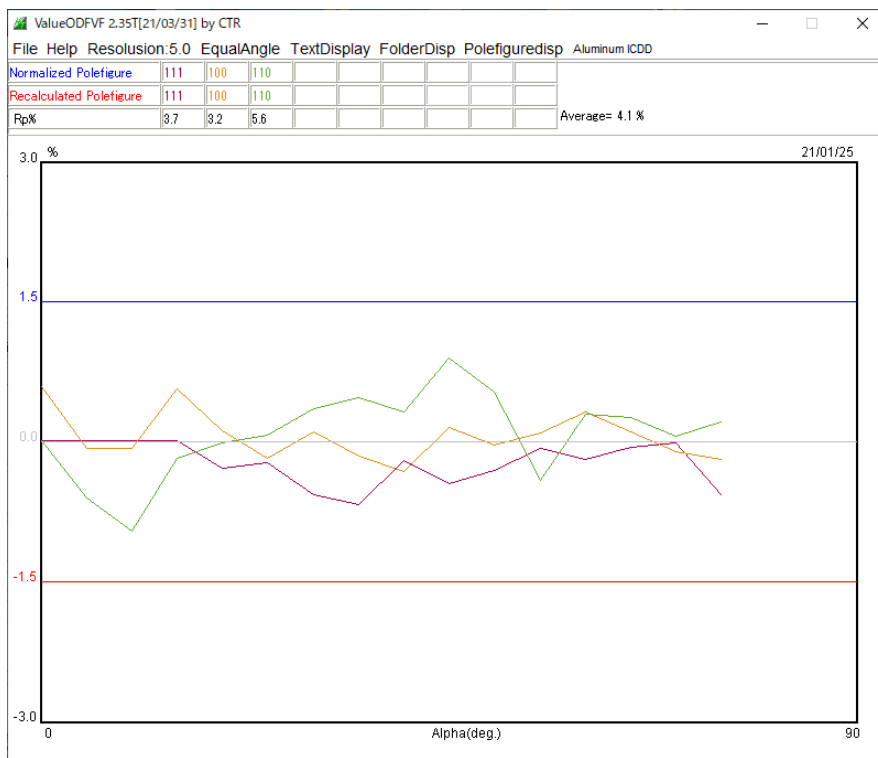
3. 3. 4 defocus補正なし+再計算Rp%



Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	6.0	6.0	9.2

Average= 7.0 %

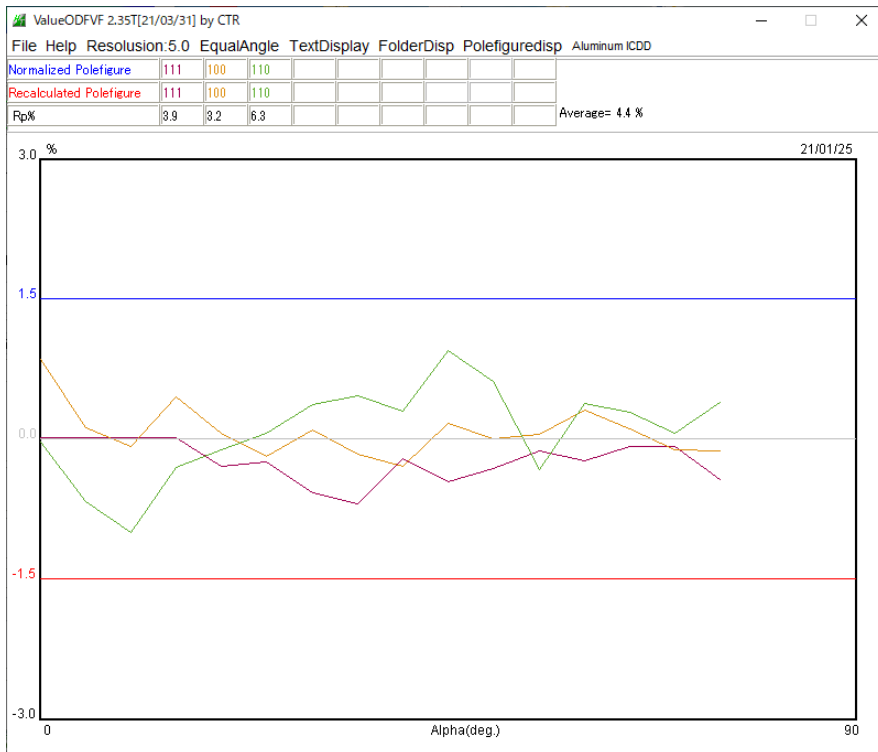
3. 3. 5内部defocus補正曲線作成し補正+再計算Rp%



Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	3.7	3.2	5.6

Average= 4.1 %

3. 3. 6実測定randomデータによる補正+再計算Rp%

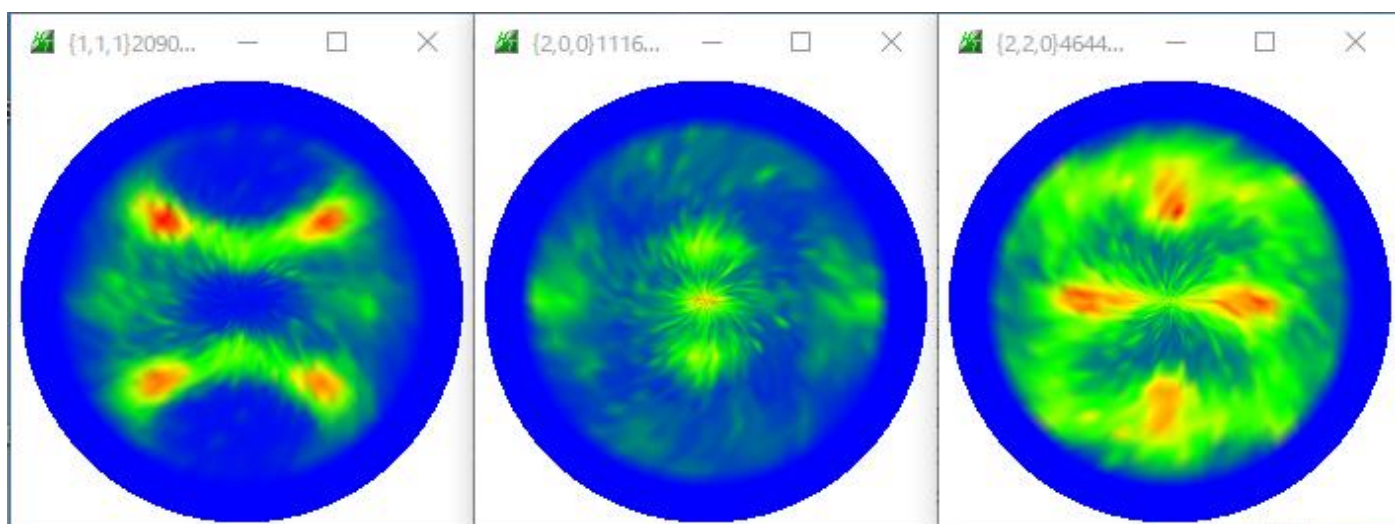


Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	3.9	3.2	6.3

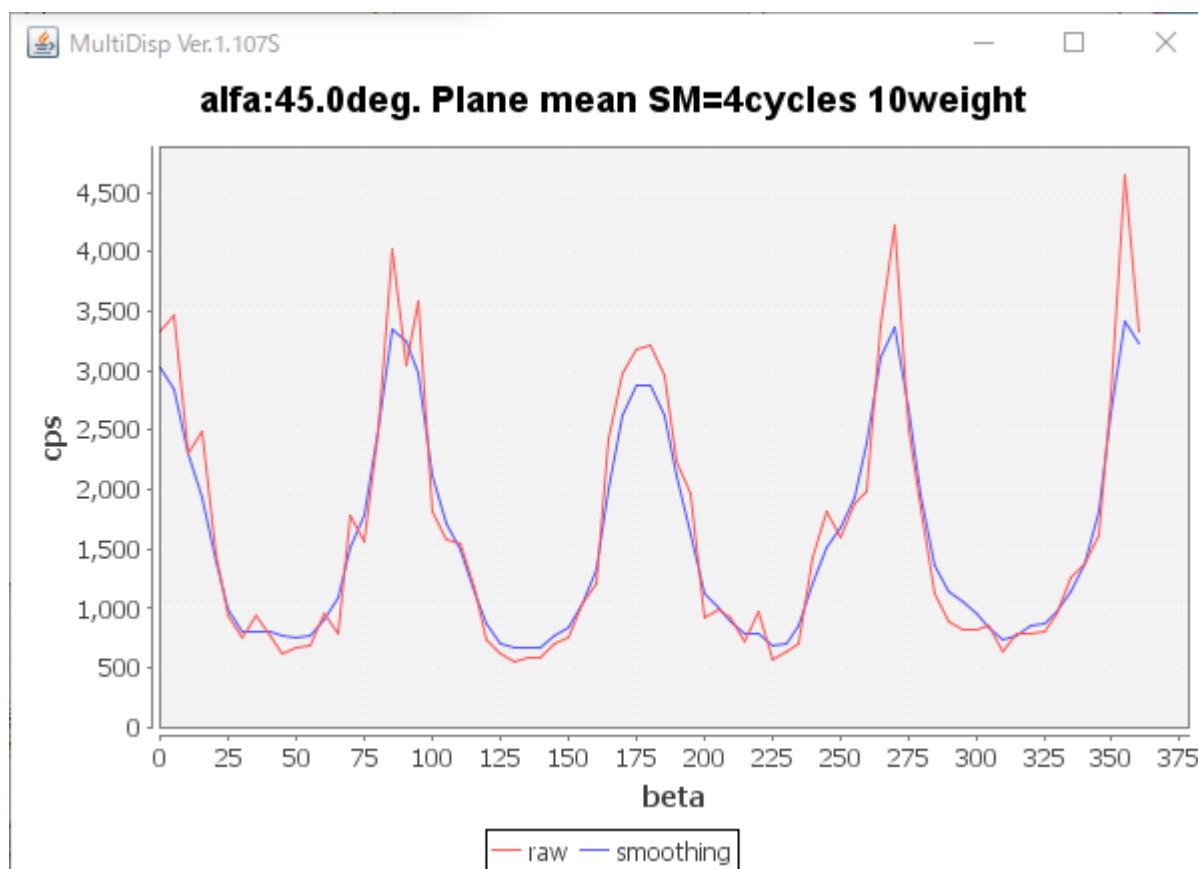
Average= 4.4 %

4. 平滑化

測定データが荒い場合、平滑化を行う。

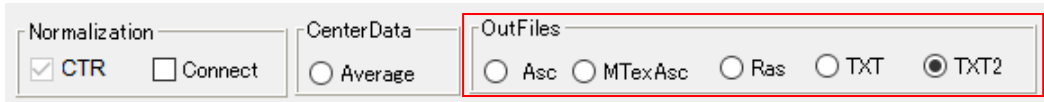


極点図を指定して、最大極密度の β 方向プロファイルで比較



5. 処理後のデータ E x p o r t

各種補正後のデータを各種フォーマットで作成できます



T X T 2は、CTR内部の極点データフォーマットで、

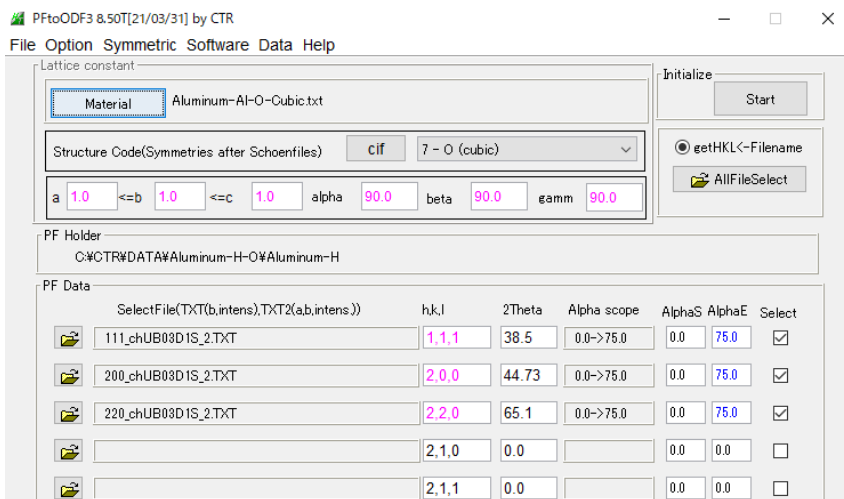
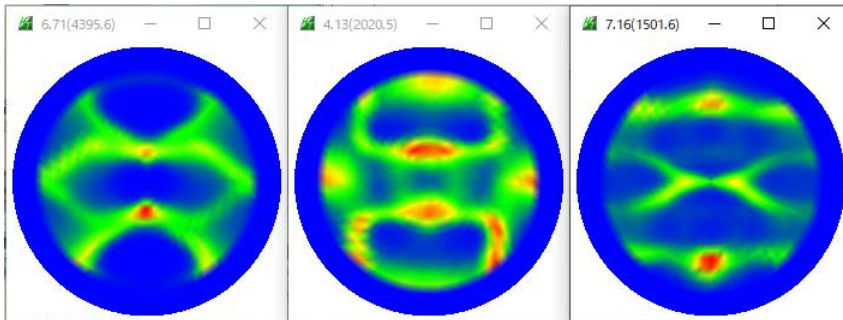
(α 、 β 、方位密度)

R Dから半時計方向回転

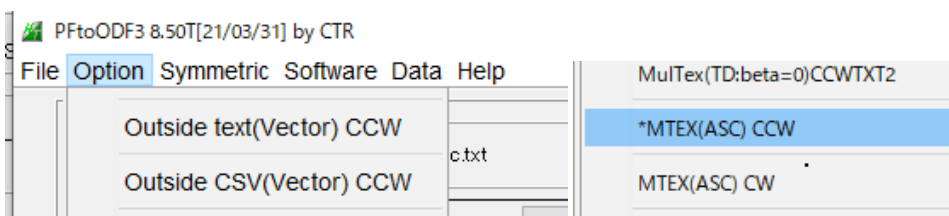
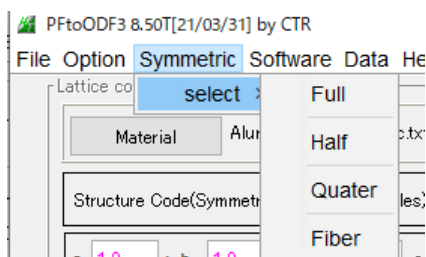
極点図中心は $\alpha = 90$

データ区切り文字は t a b

6. 各種ODFデータフォーマット変換

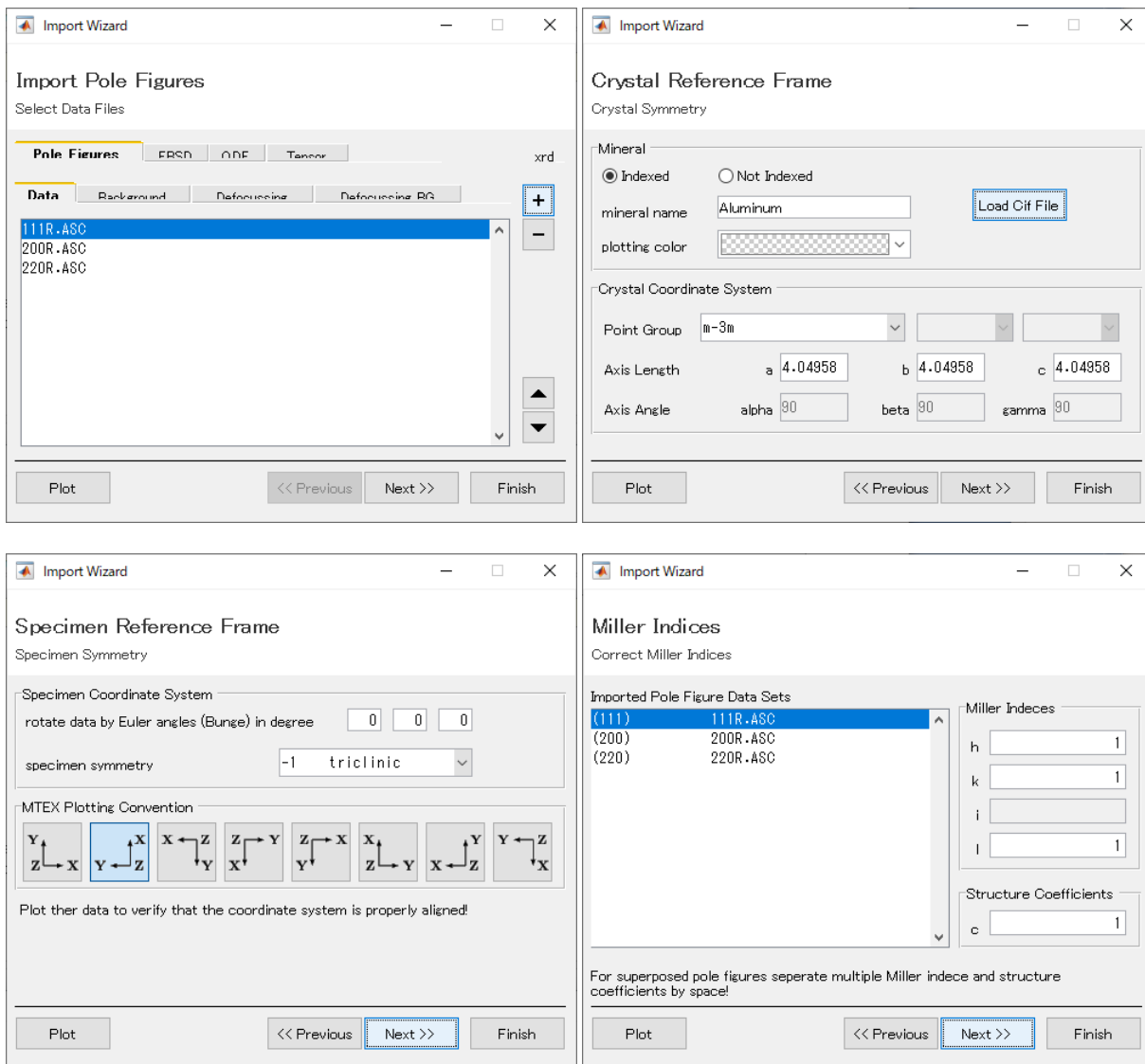


極点図の対称性

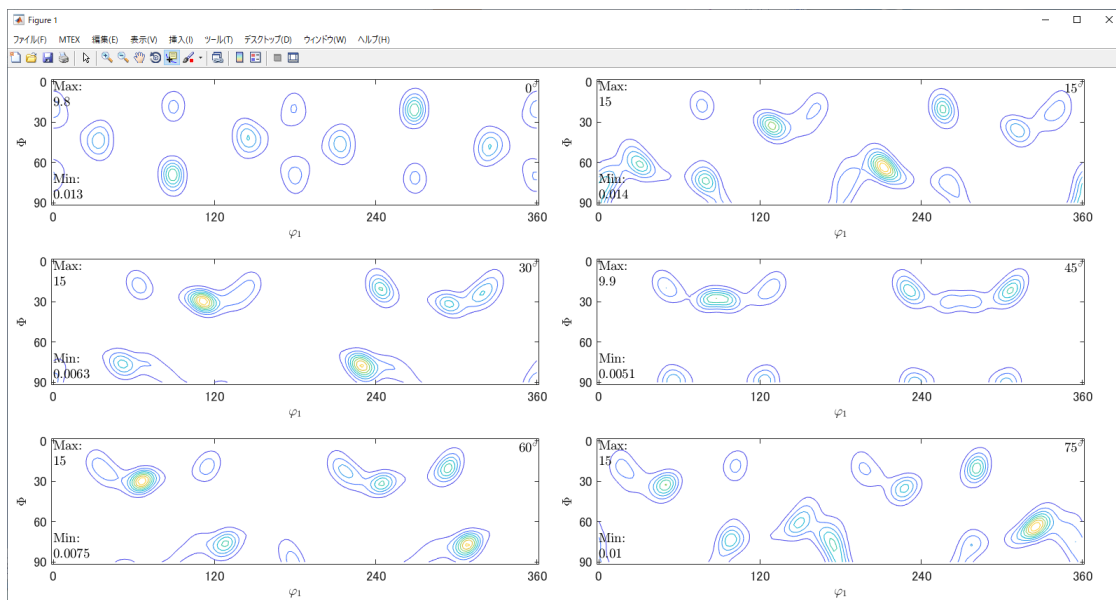


M T E Xへのデータは、M T E X (A S C) C C Wを選択 (左回転、TDは左)

7. XRDデータをMTEXに読み込み



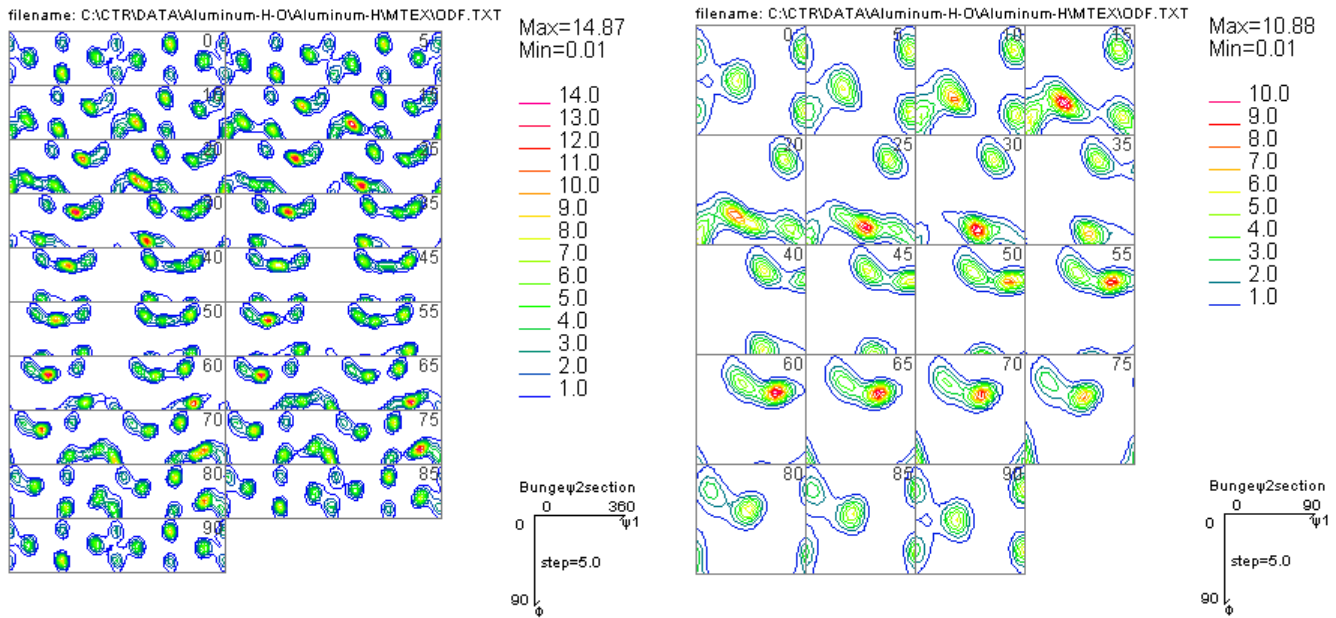
$odf = \text{calcODF}(pf)$



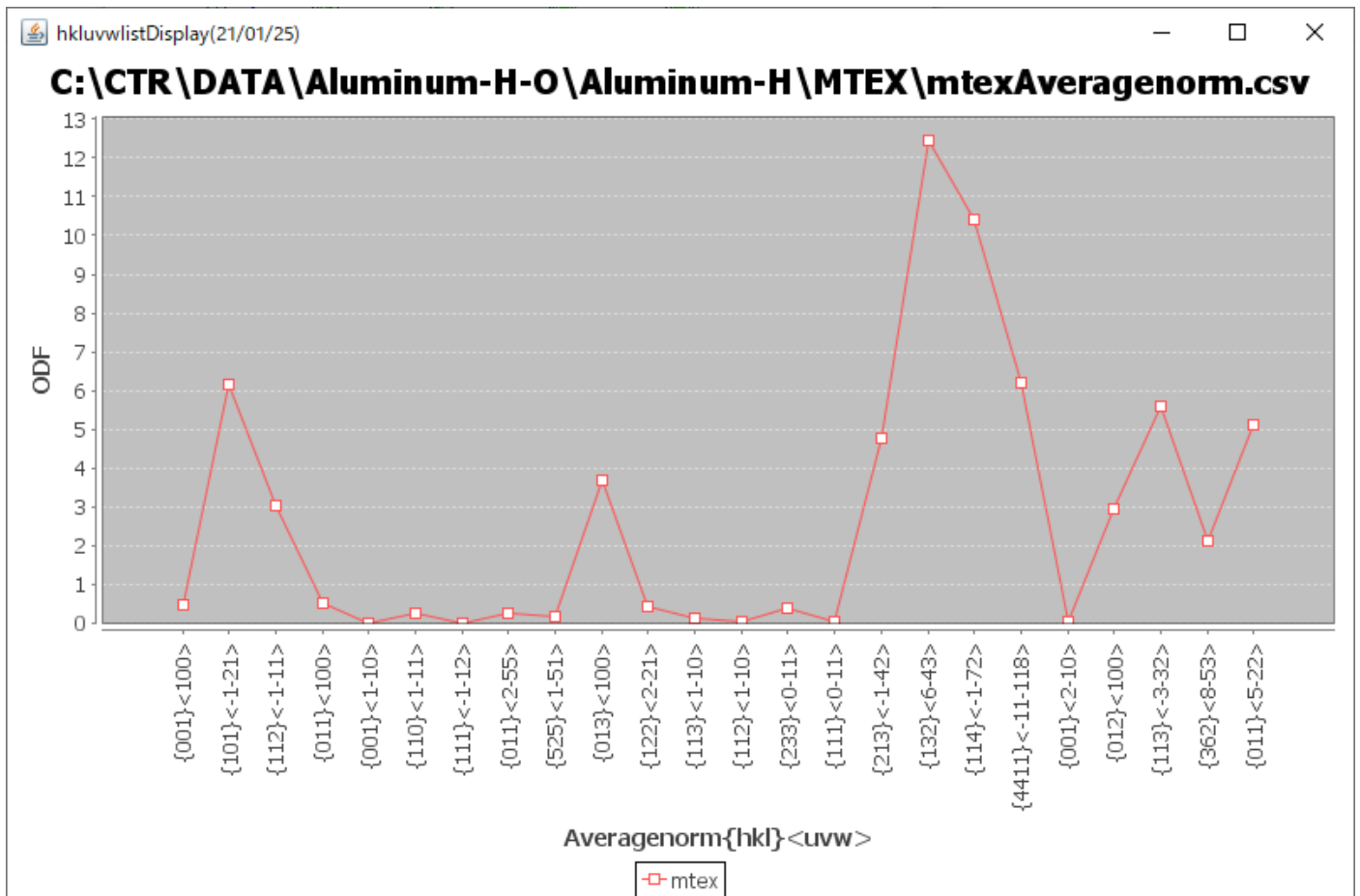
ODF図と逆極点図をExport

```
export(odf,'ODF.TXT'), export(rpf,'RPF'), exportIPDF(odf,zvector,'ND.TXT')
```

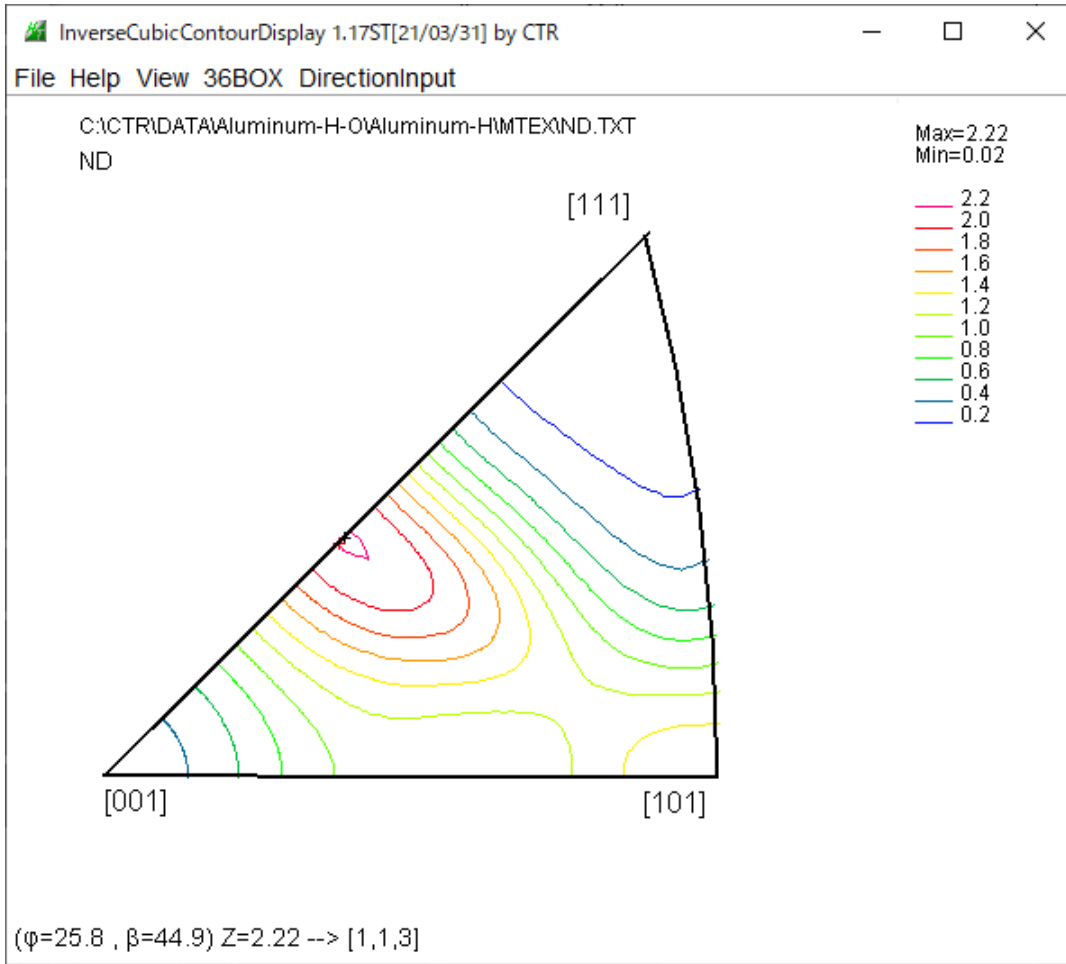

9. ExportしたODF図を1/4対称操作、方位計算



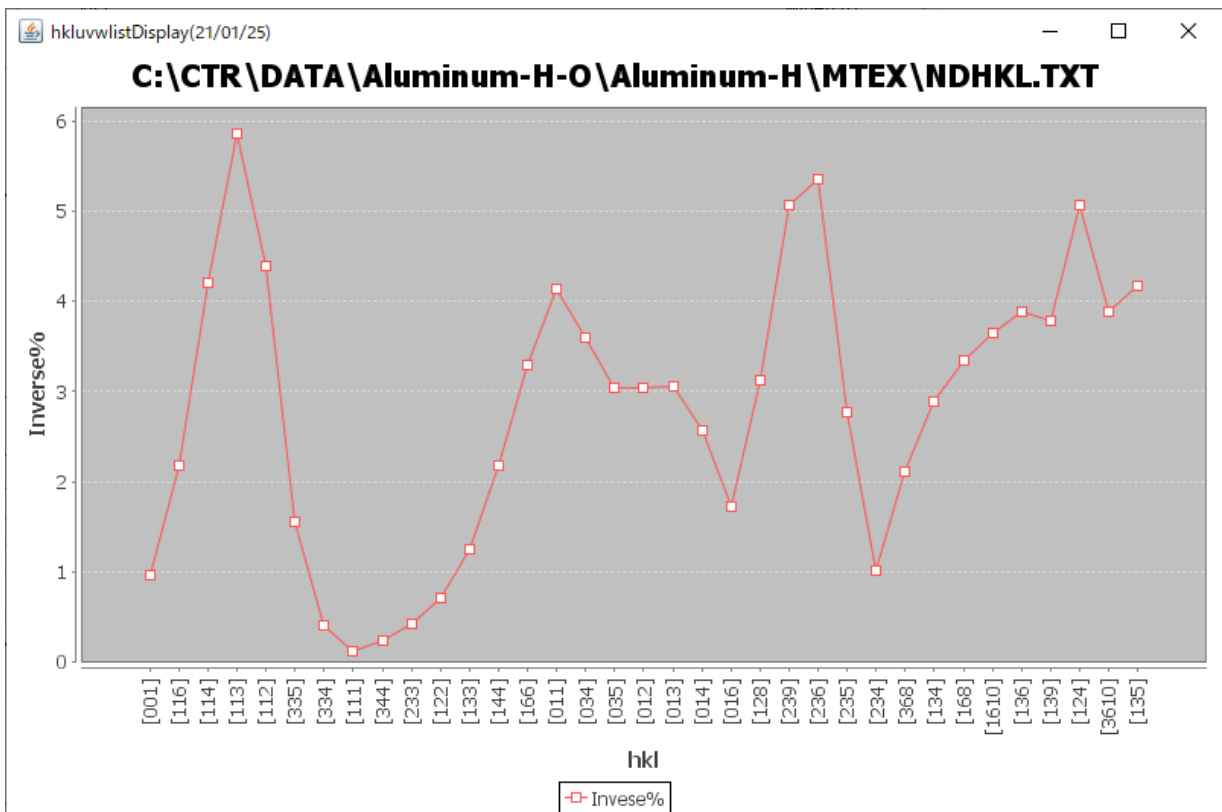
方位計算



10. Exportした逆極点図から方位計算



36Boxによる方位計算



11. EBSDデータ

EBSDデータとして、OIM (Ang), Oxford (txt), Bruker (txt) とその他がある。

OIM (ang) データと HKL(ctf) データは MTEX のローダで直接読み込めるがその他の EBSD データは GenericInterFace を介して読み込む、あるいは EBSDtoODF 経由で読み込む EBSDtoODF ソフトウェアでは、ang, ctf, csv, txt データを読み込み ang, ctf, SOR データに変換する。

183:	2.49254	1.02219	3.14177	14.40000	0.00000	5285.7	0.057	0	1	1.805
184:	5.38602	1.44343	4.36303	14.70000	0.00000	5805.3	0.029	0	1	1.984
185:	2.85293	0.67686	3.23755	15.00000	0.00000	5361.5	0.000	0	1	1.961
186:	2.83690	2.32847	6.12133	15.30000	0.00000	7166.3	0.400	0	1	0.995
187:	3.08308	0.77067	2.95333	15.60000	0.00000	7436.7	0.429	0	1	0.839
188:	5.97129	0.82975	1.74023	15.90000	0.00000	8684.3	0.400	0	1	0.535
189:	6.22366	2.39495	4.88707	16.20000	0.00000	8725.7	0.400	0	1	0.517
190:	6.22926	2.39227	4.89569	16.50000	0.00000	8465.8	0.400	0	1	0.504
191:	1.37853	1.44215	0.83453	16.80000	0.00000	7798.8	0.371	0	1	0.701
192:	4.52046	1.70194	5.44927	17.10000	0.00000	7695.7	0.371	0	1	0.461
193:	1.37730	1.43457	0.83165	17.40000	0.00000	7829.5	0.400	0	1	0.684
194:	2.81953	2.30907	6.10201	17.70000	0.00000	7558.0	0.371	0	1	0.423
195:	1.38086	1.44989	0.83551	18.00000	0.00000	7576.2	0.371	0	1	0.630
196:	1.37885	1.44484	0.83819	18.30000	0.00000	8413.9	0.400	0	1	0.677
197:	2.83332	2.29921	6.10903	18.60000	0.00000	9020.6	0.400	0	1	0.447
198:	2.83810	2.31215	6.11559	18.90000	0.00000	8864.8	0.400	0	1	0.763
199:	2.83713	2.31223	6.12315	19.20000	0.00000	9342.6	0.400	0	1	0.576
200:	2.83066	2.30934	6.11991	19.50000	0.00000	8953.8	0.429	0	1	0.494

ang データ : MTEX, TextTools で解析

ctf データ : MTEX で解析

SOR データ : LaboTex で解析

12. ferrite.angをferrite.ctfに変換しMTEXに読み込む

The screenshot shows the EBSDtoODF 1.01T software interface. The 'InputData' section has 'InputFile' set to 'C:\mtext-5.4.0\data\EBSD\ferrite.ang' and 'Material' set to 'Ferrite'. The 'MaterialData' section shows 'Material' as 'cif', 'Group' as 'P1', 'Symmetry(OIM)' as '43', 'HKLCode' as '11', and 'LaboTexCode' as '7 - O (cubic)'. Lattice constants are set to Aaxis: 2.87, Baxis: 2.87, Caxis: 2.87, alpha: 90.0, beta: 90.0, gamma: 90.0. A table of phases is displayed, with the first row highlighted in red: '4: 2.87 2.87 2.87 90.0 90.0 90.0 Ferrite 11'. The 'Makefile' section shows 'DataStartline' as 135, 'PhasePotision' as 8, 'Selectphase' as 1, and 'Holder' as 'C:\mtext-5.4.0\data\EBSD\ferriteEtoO.ctf'. A 'Filemake' button is visible with the text 'C:\mtext-5.4.0\data\EBSD\ferriteEtoO.ctf make complete !!'.

angデータのSymmetry

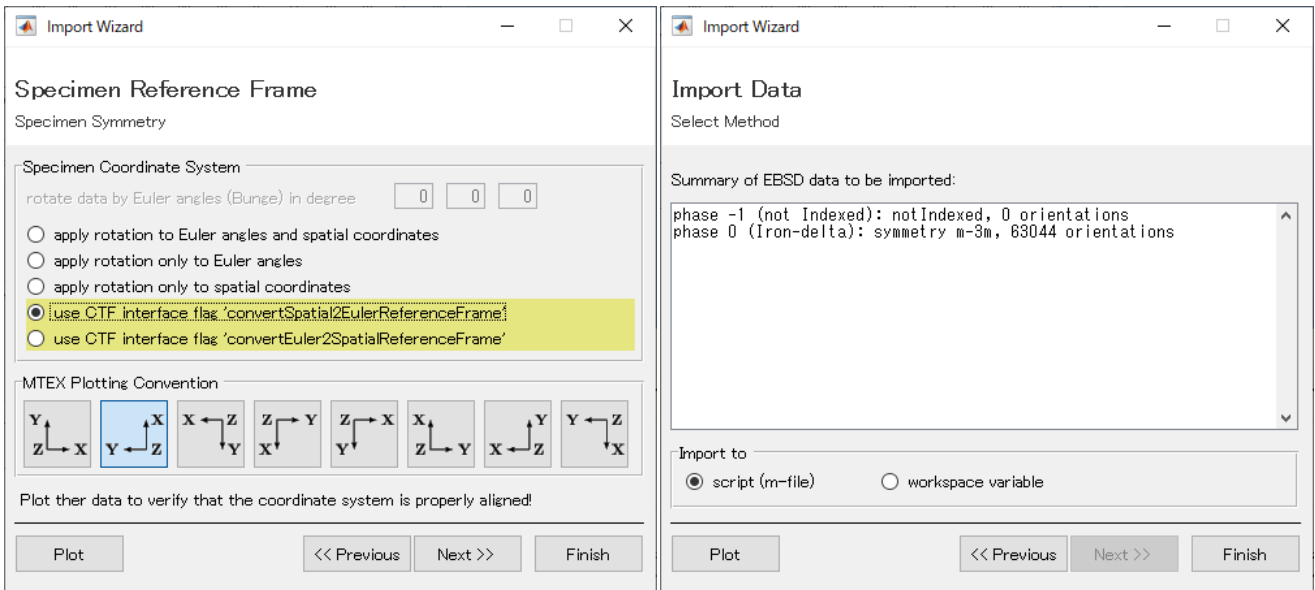
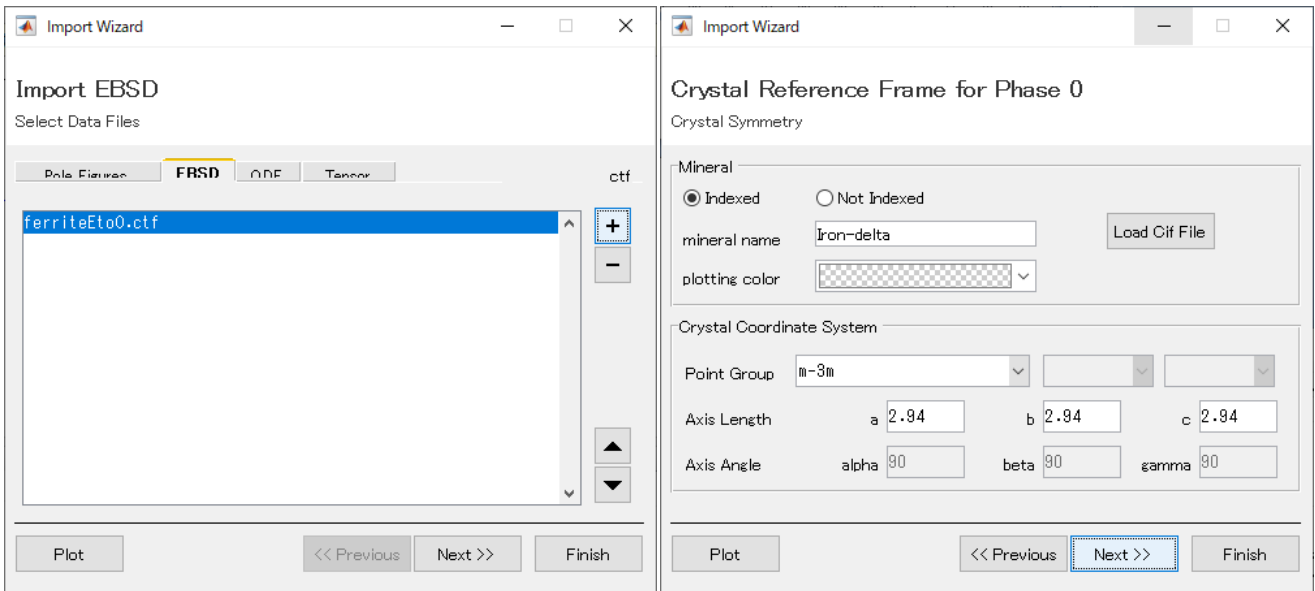
```
# Phase 1↓
# MaterialName          Ferrite↓
# Formula                Fe↓
# Info                   ↓
# Symmetry               43↓
# LatticeConstants      2.870 2.870 2.870 90.000 90.000 90.000↓
```

変換されたSymmetry情報

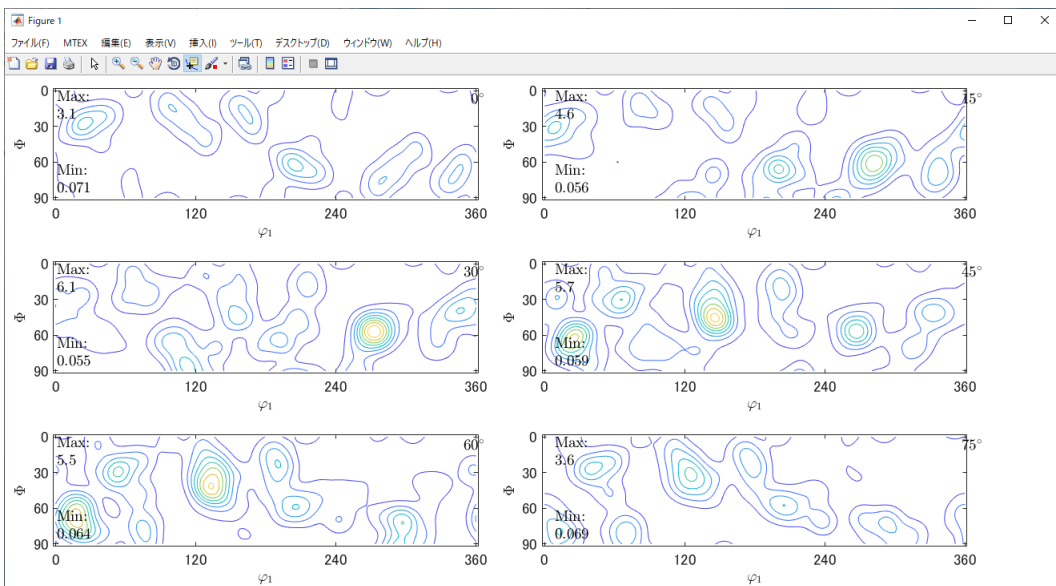
This screenshot shows the 'MaterialData' section of the software interface. It includes fields for 'Material' (cif), 'Group' (P1), 'Symmetry(OIM)' (43), 'HKLCode' (11), and 'LaboTexCode' (7 - O (cubic)). Lattice constants are also shown: Aaxis (2.87), Baxis (2.87), Caxis (2.87), alpha (90.0), beta (90.0), and gamma (90.0).

ang : 43 **HKLcode (ctf) : 11** LaboTex (SOR) : 7

13. MTEXで ferrite.ctf の処理



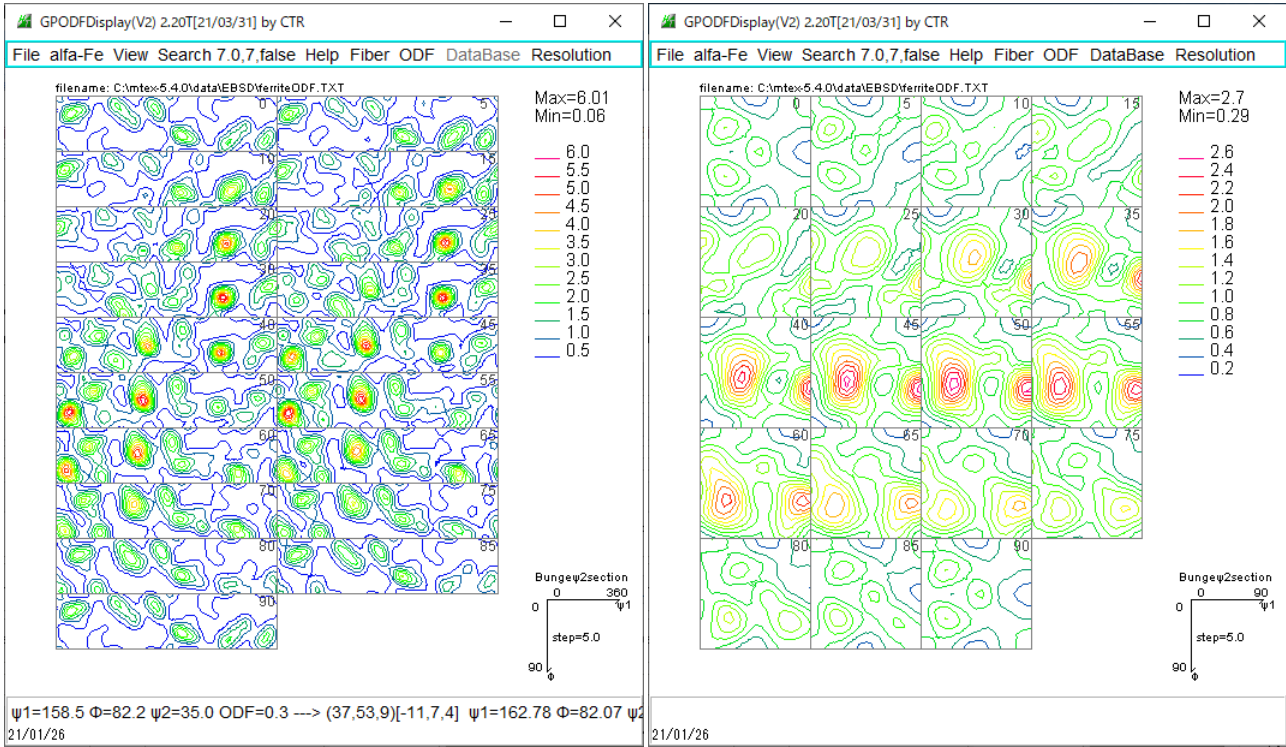
`odf=calcDensity(ebsd('Iron-delta').orientations)`



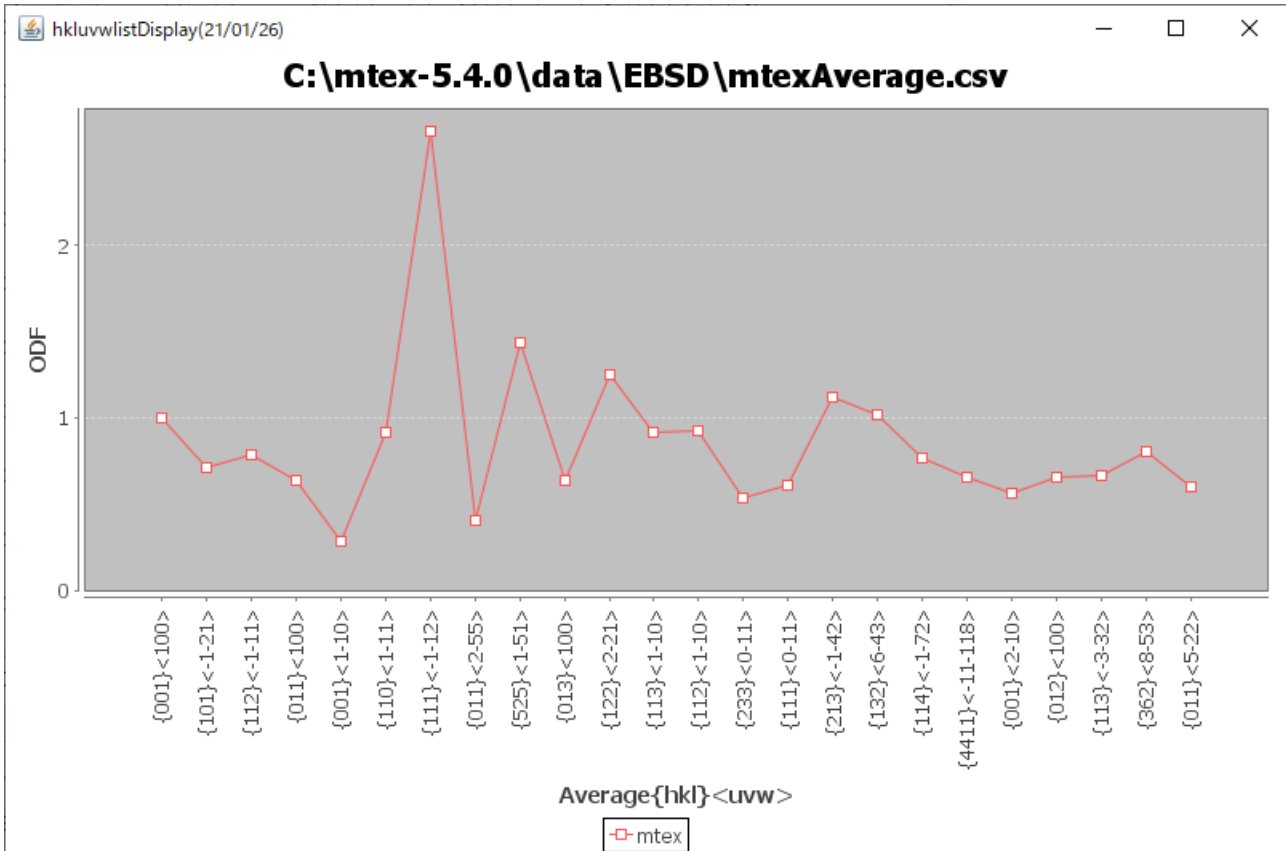
ODF と逆極点図を E x p o r t

13. 1 ExportしたODFから方位計算

1 / 4 対称操作



方位計算



13. 2 Exportした逆極点図から方位計算

