

ODF解析時のR p %評価法

2025年11月30日

HelperTex Office

1. 概要
2. 測定データ
3. d e f o c u s
4. L a b o T e x の場合
 4. 1 d e f o c u s 補正処理結果
 4. 2 d e f o c u s 補正なし
 4. 3 V a l u e O D F V F による d e f o c u s 補正
 4. 4 L a b o T e x による方位密度比較
5. n e w O D F の場合 (S m a r t L a b)
 5. 1 d e f o c u s 補正処理結果
 5. 2 d e f o c u s 補正なし
 5. 3 V a l u e O D F V F による d e f o c u s 補正
 5. 4 n e w O D F による方位密度比較
6. S t a n d a r d O D F の場合
 6. 1 d e f o c u s 補正処理結果
 6. 2 d e f o c u s 補正なし
 6. 3 V a l u e O D F V F による d e f o c u s 補正
 6. 4 S t a n d a r d O D F による方位密度比較
7. まとめ

1. 概要

ODF解析では、極点処理を行った3面以上の極点図から計算が行われます。

ODFに対し、入力極点図とODF解析結果からRp %が計算されます。

$$RP_{\{hkl\}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\{PF_{exp.}\}_i - \{PF_{calc.}\}_i}{\{PF_{exp.}\}_i} \right| \cdot 100\%$$

where :

$RP_{\{hkl\}}$ - relative error for $\{hkl\}$ pole figure,

$\{PF_{exp.}\}_i$ - intensity of experimental (corrected and normalized) pole figure in point i,

$\{PF_{calc.}\}_i$ - intensity of calculated pole figure in point i,

N - number of measured points on pole figure.

$$RP = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M RP_{\{hkl\}_j}$$

Rp %はdefocus不良、異常ピークにより値が大きくなります。

通常、 β 方向の平均値を α の関数とした場合、正常であれば $\pm 1.5\%$ 以内に収まります。

以下に、アルミニウム材料を例に、

defocus補正なし

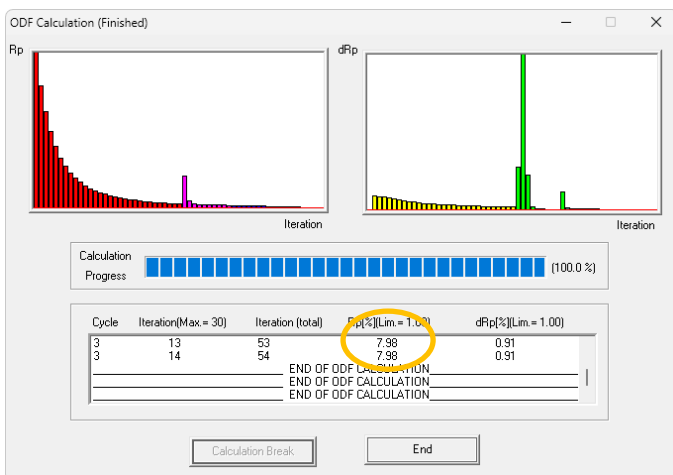
defocus補正あり

defocus補正なしをValueODFVFによるdefocus補正結果を比較します。

LaboTexのRp %

newODFのRp %

ODF計算



ODF計算

計算方式: WIMVモデル

試料の対称性: 対称化なし

α解析開始角度(°): 0.00

α解析終了角度(°): 90.00

ODFグリッド

φ1ステップ(°): 5.00

φ2ステップ(°): 5.00

φ3ステップ(°): 5.00

パラメーター

結晶相: Al

最大繰り返し回数: 10

ε = 0.0100

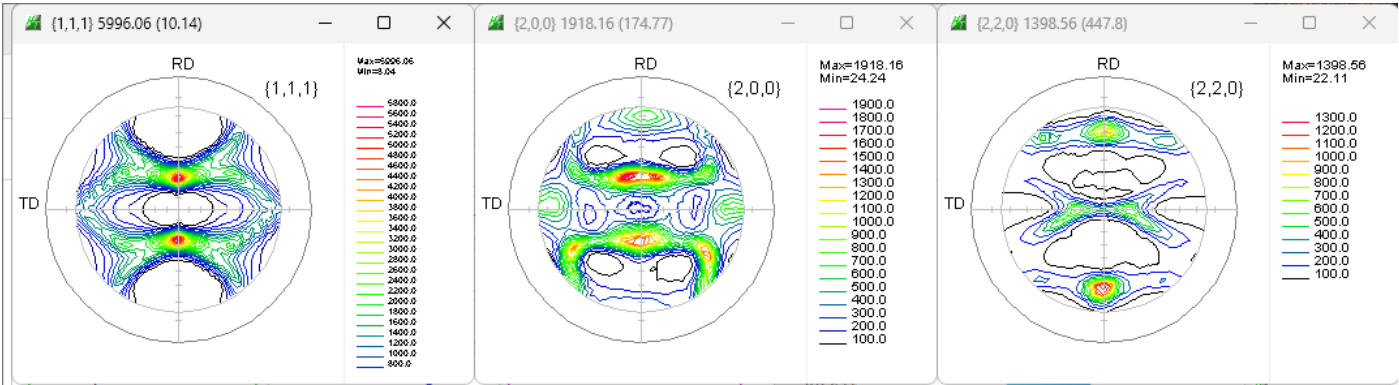
バックグラウンドをフィッティング: ☐

RP因子=8.90 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算

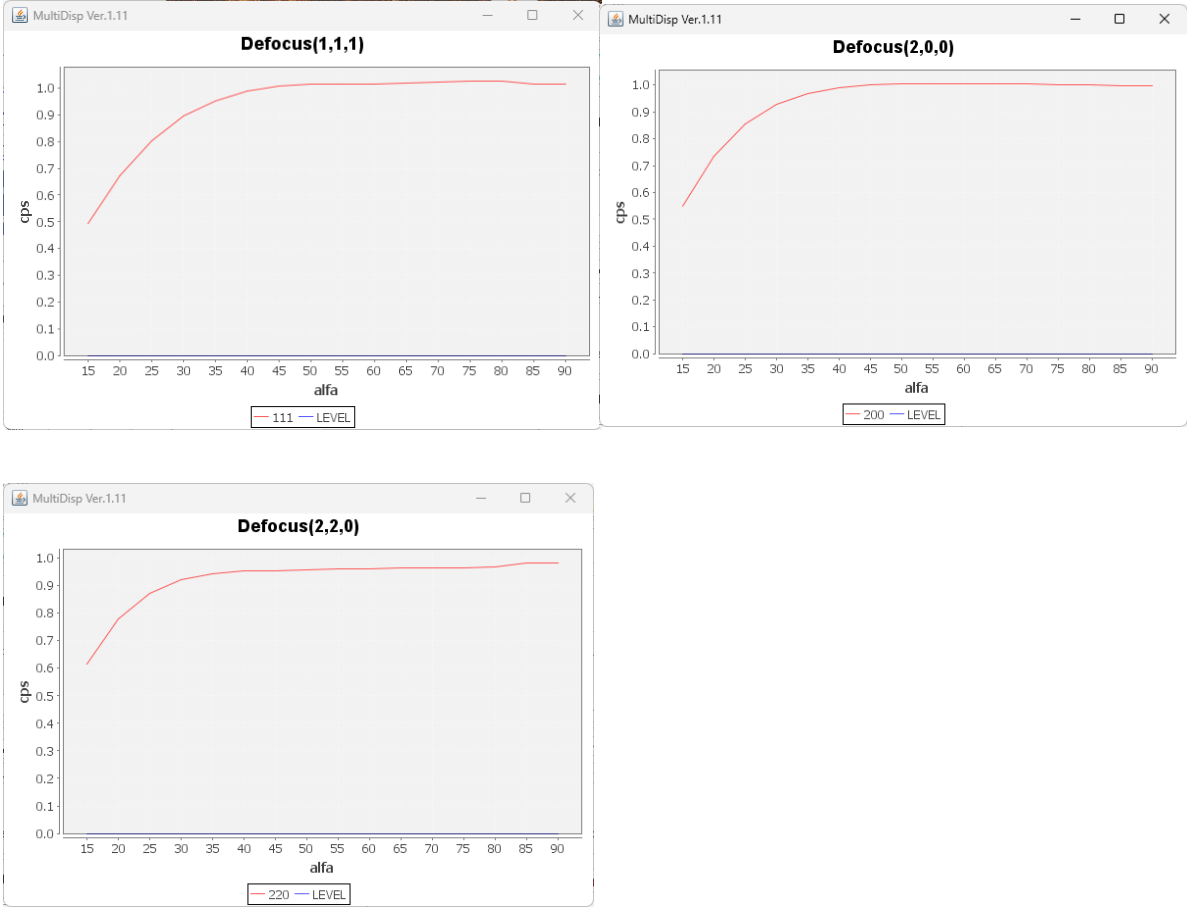
このRp %が何を意味するのか？

ODF解析結果の再計算極点図をExportし評価します。

2. 測定データ

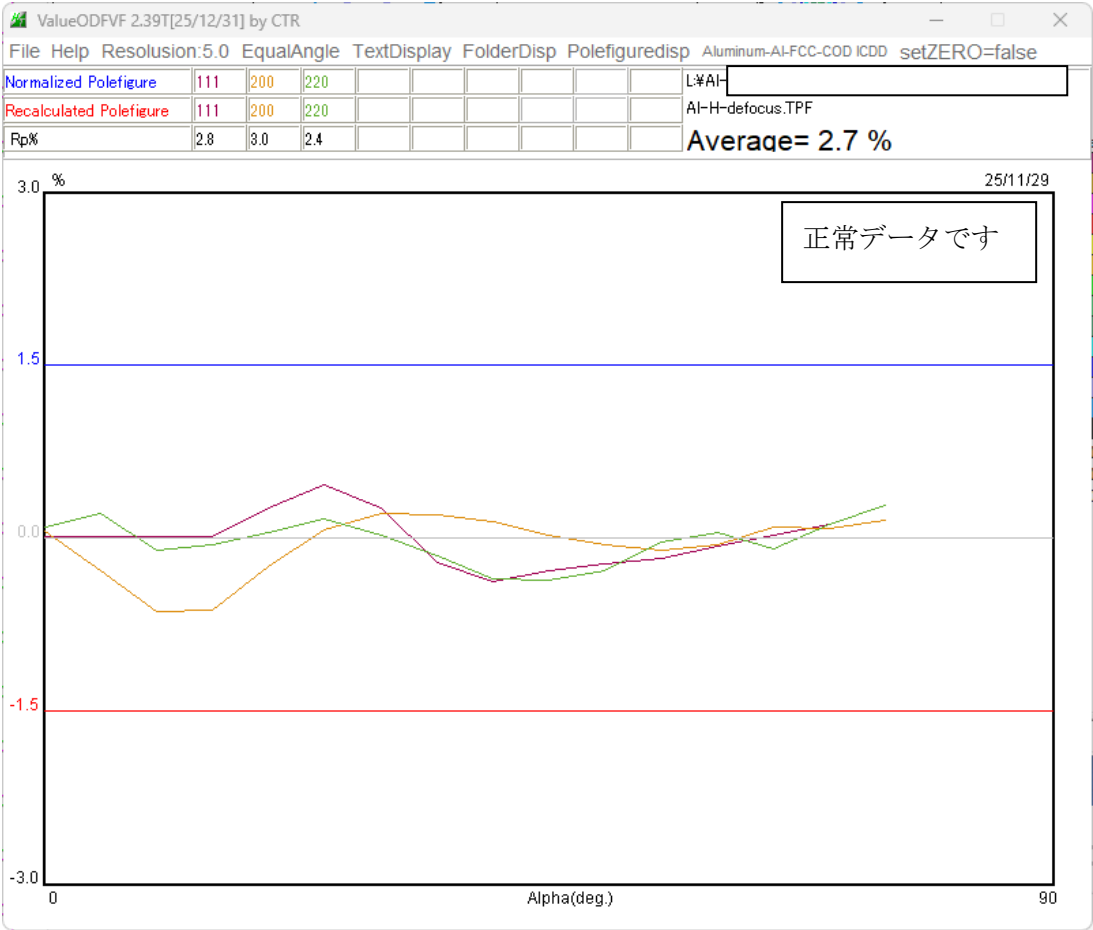
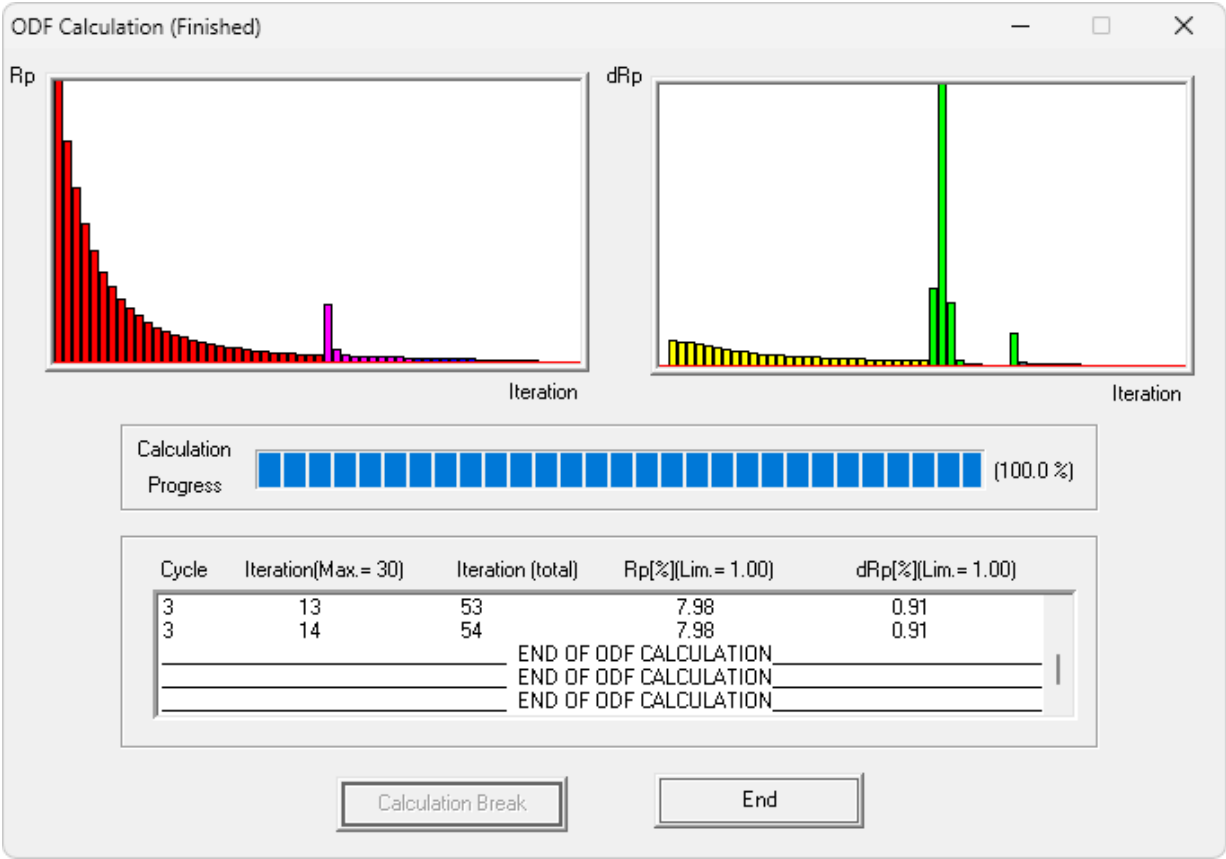


3. defocus



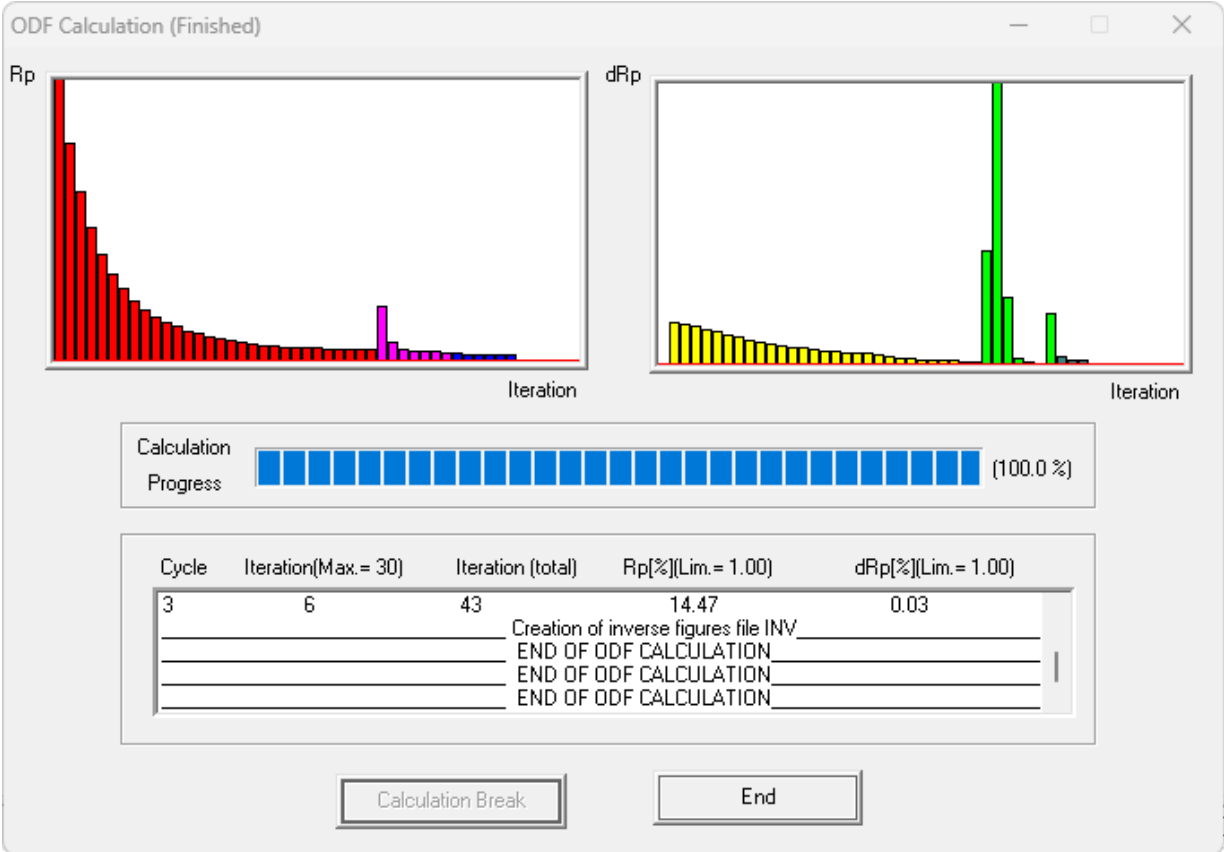
4. LaboTexの場合

4.1 defocus補正処理結果



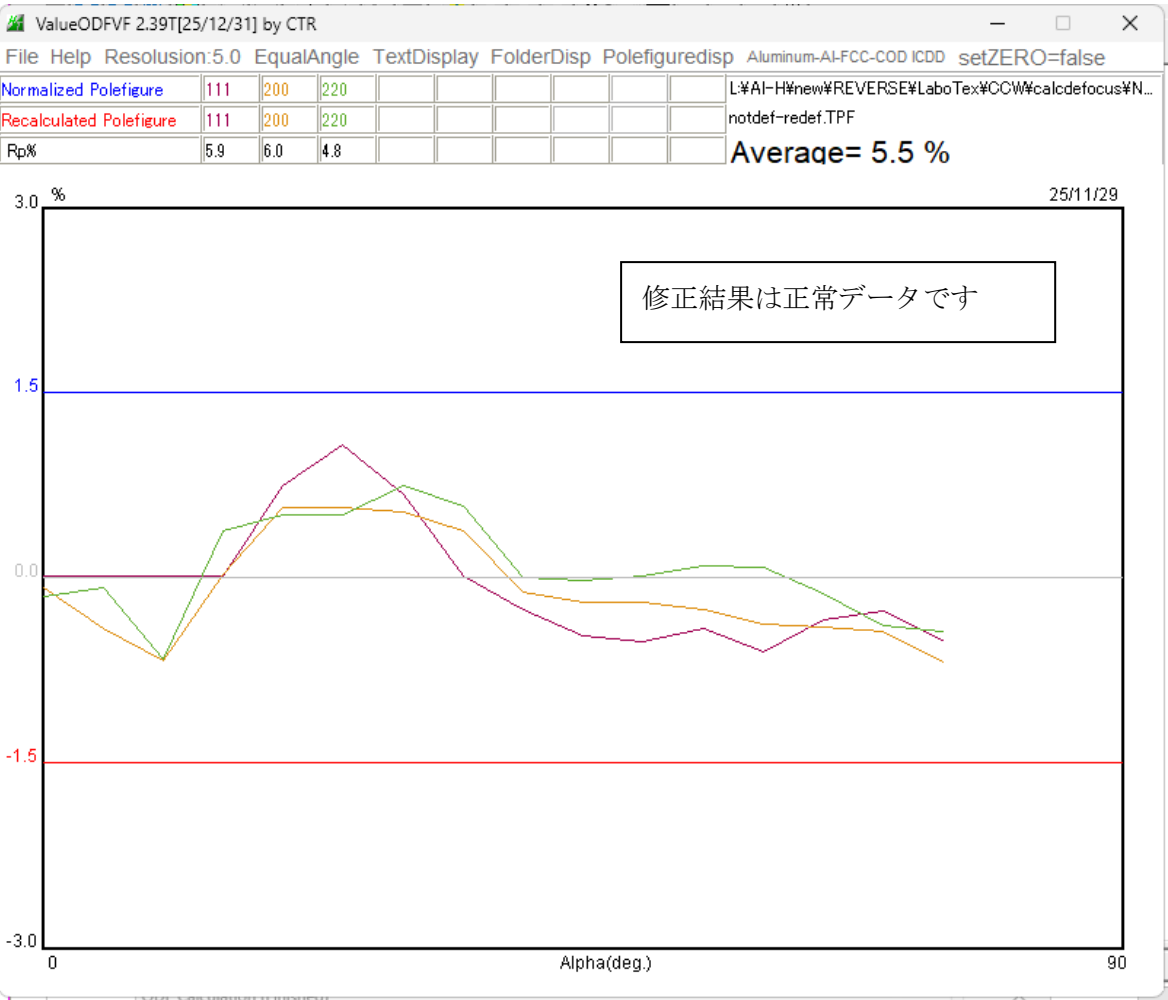
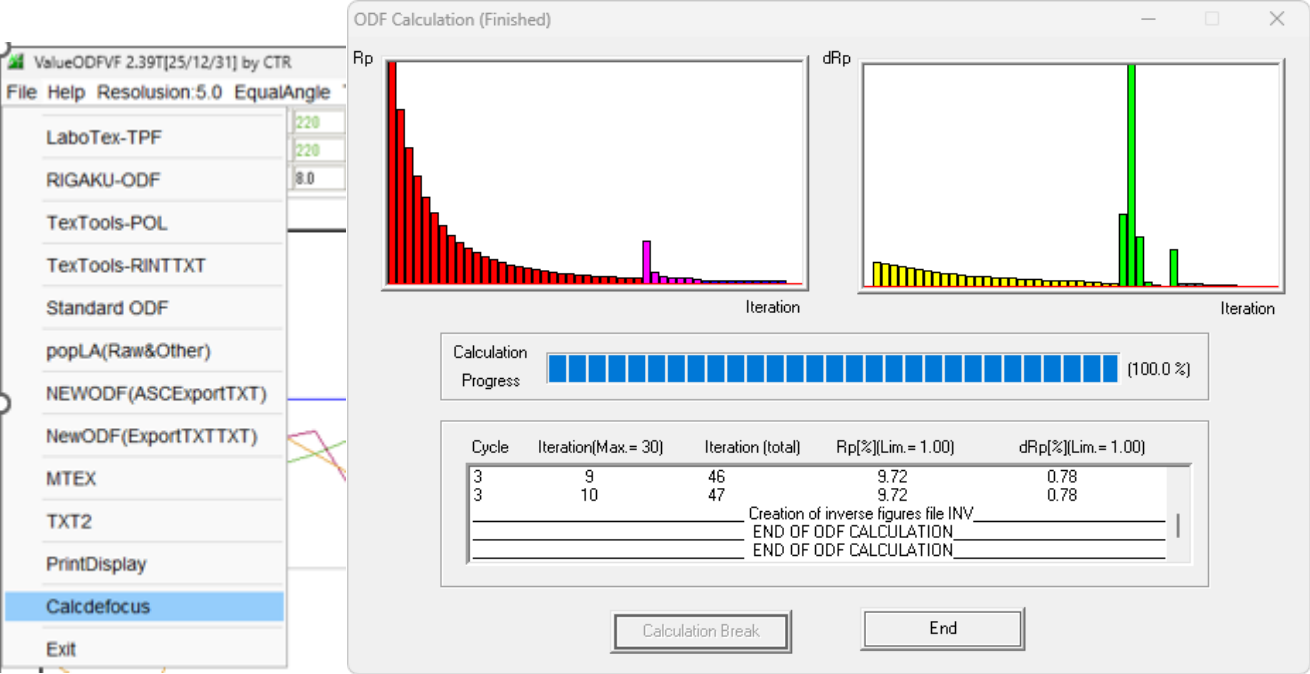
プロファイルはプラスマイナス1.5%に収まります。

4. 2 d e f o c u s 補正なし



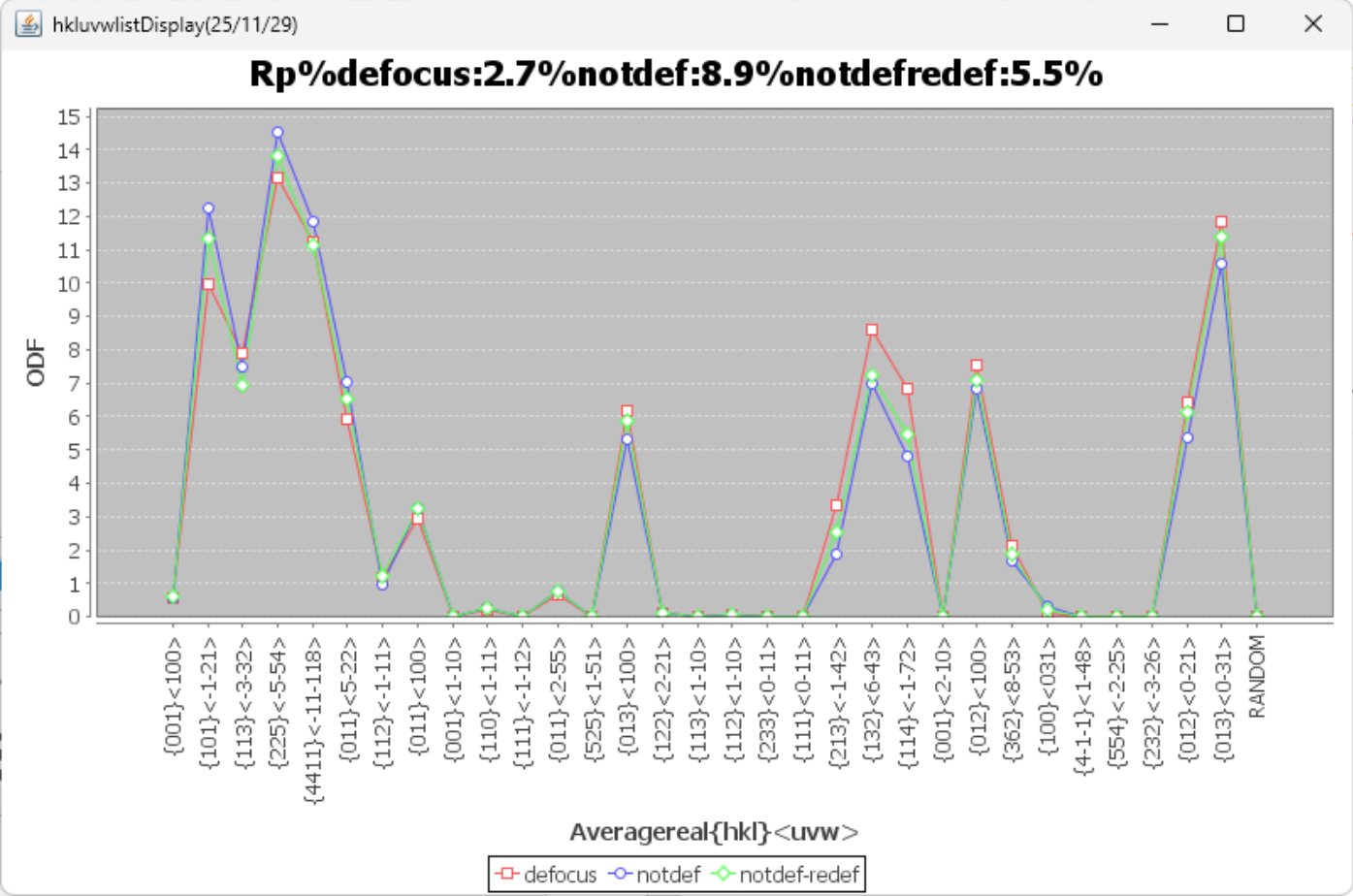
d e f o c u s 補正なしでは、極点図の外周に向けて下がり、変動が大きい

4. 3 ValueODFVFによるdefocus補正
defocus補正なし結果からdefocus曲線を計算



計算によるdefocusで、極点図の外周に向けて下がり改善される。

4. 4 L a b o T e x による方位密度比較



5. newODFの場合 (SmartLab)

5. 1 defocus補正処理結果

ODF計算

ODFを計算

ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: WIMVモデル

試料の対称性: 対称化なし

α解析開始角度(°): 0.00

α解析終了角度(°): 90.00

ODFグリッド

φ₁ステップ(°): 5.00

Φステップ(°): 5.00

φ₂ステップ(°): 5.00

パラメーター

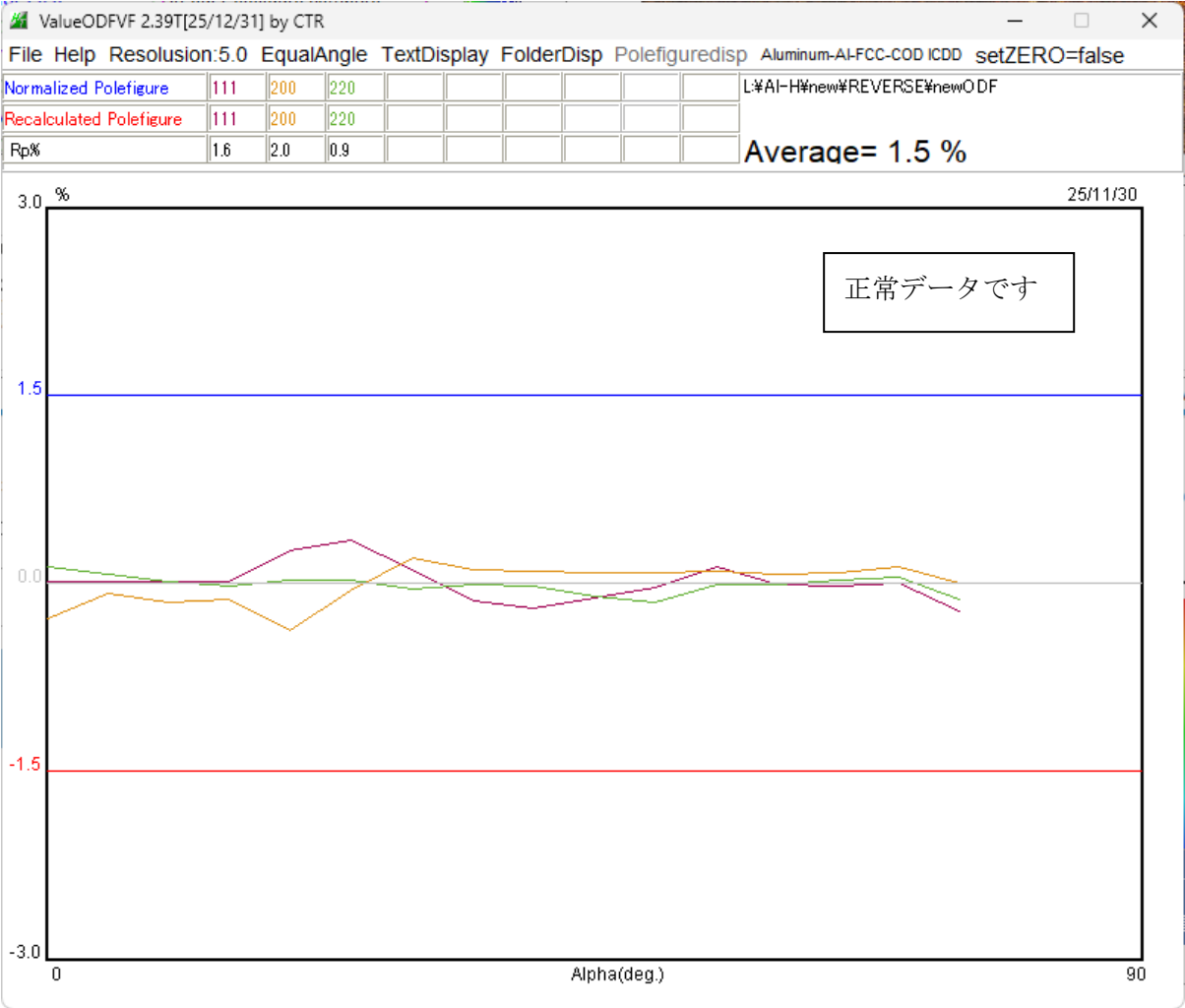
結晶相: Al

最大繰り返し数: 10

ε = 0.0100

バックグラウンドをフィッティング: ☐

RP因子=8.90 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算



5. 2 d e f o c u s 補正なし

ODF計算

ODFを計算 ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: WIMVモデル

試料の対称性 対称化なし

α 解析開始角度(°): 0.00

α 解析終了角度(°): 90.00

ODFグリッド

φ_1 ステップ(°): 5.00

Φ ステップ(°): 5.00

φ_2 ステップ(°): 5.00

パラメーター

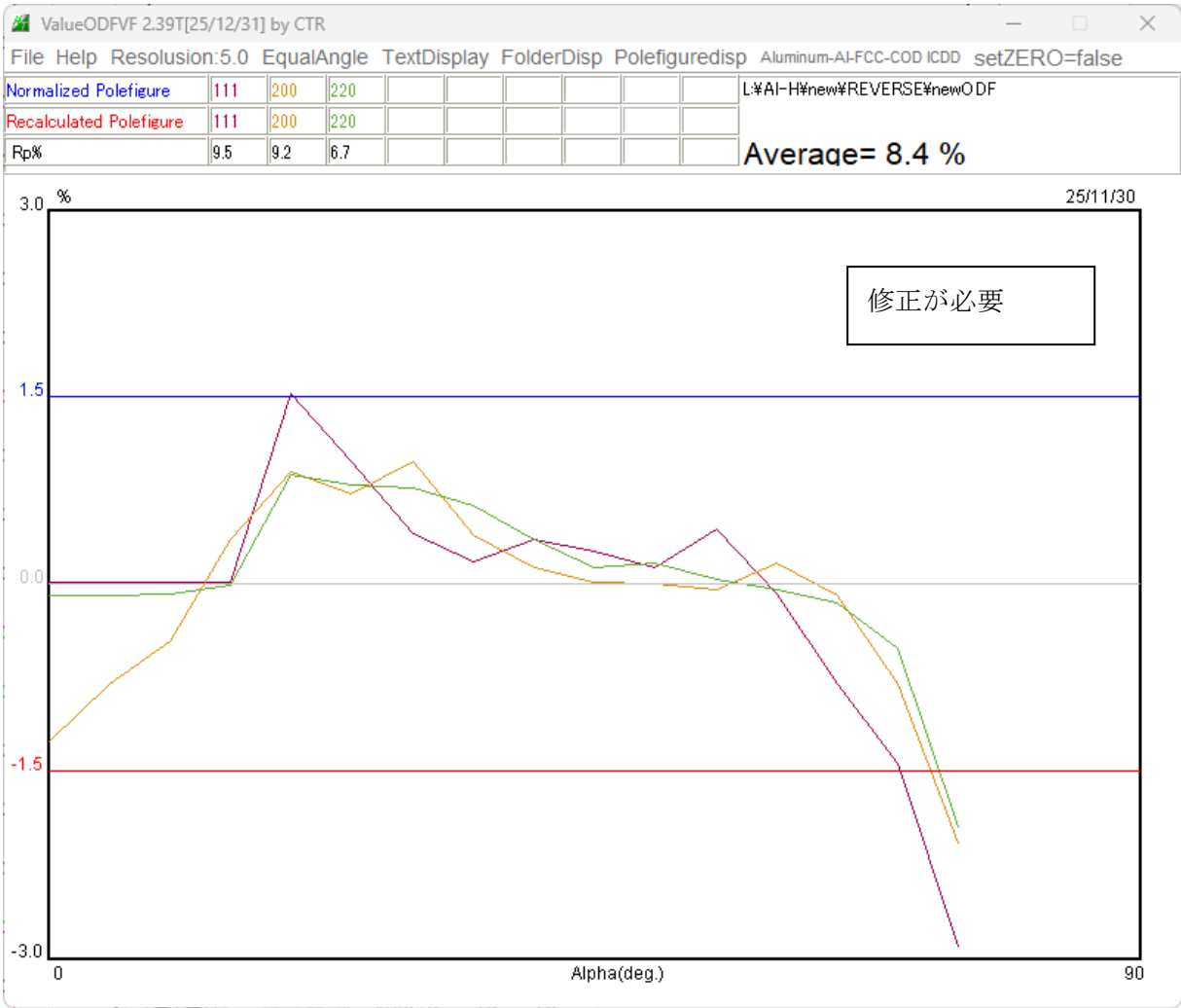
結晶相: Al

最大繰り返し数: 10

$\epsilon =$ 0.0100

バックグラウンドをフィッティング: ☐

RP因子=14.72 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算



5. 3 ValueODFVFによるdefocus補正
defocus補正なし結果からdefocus曲線を計算

ODF計算

ValueODFVF 2.39T[25/12/31] by CTR

File Help Resolution:5.0 EqualAngle

LaboTex-TPF

220

RIGAKU-ODF

220

6.7

TextTools-POL

TextTools-RINTTXT

Standard ODF

popLA(Raw&Other)

NEWODF(ASCEXportTXT)

NewODF(ExportTXTTXT)

MTEX

TXT2

PrintDisplay

Calcdefocus

Exit

ODFを計算

ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: WIMVモデル

試料の対称性 対称化なし

α解析開始角度(°): 0.00

α解析終了角度(°): 90.00

ODFグリッド

φ:ステップ(°): 5.00

Φステップ(°): 5.00

φ:ステップ(°): 5.00

パラメーター

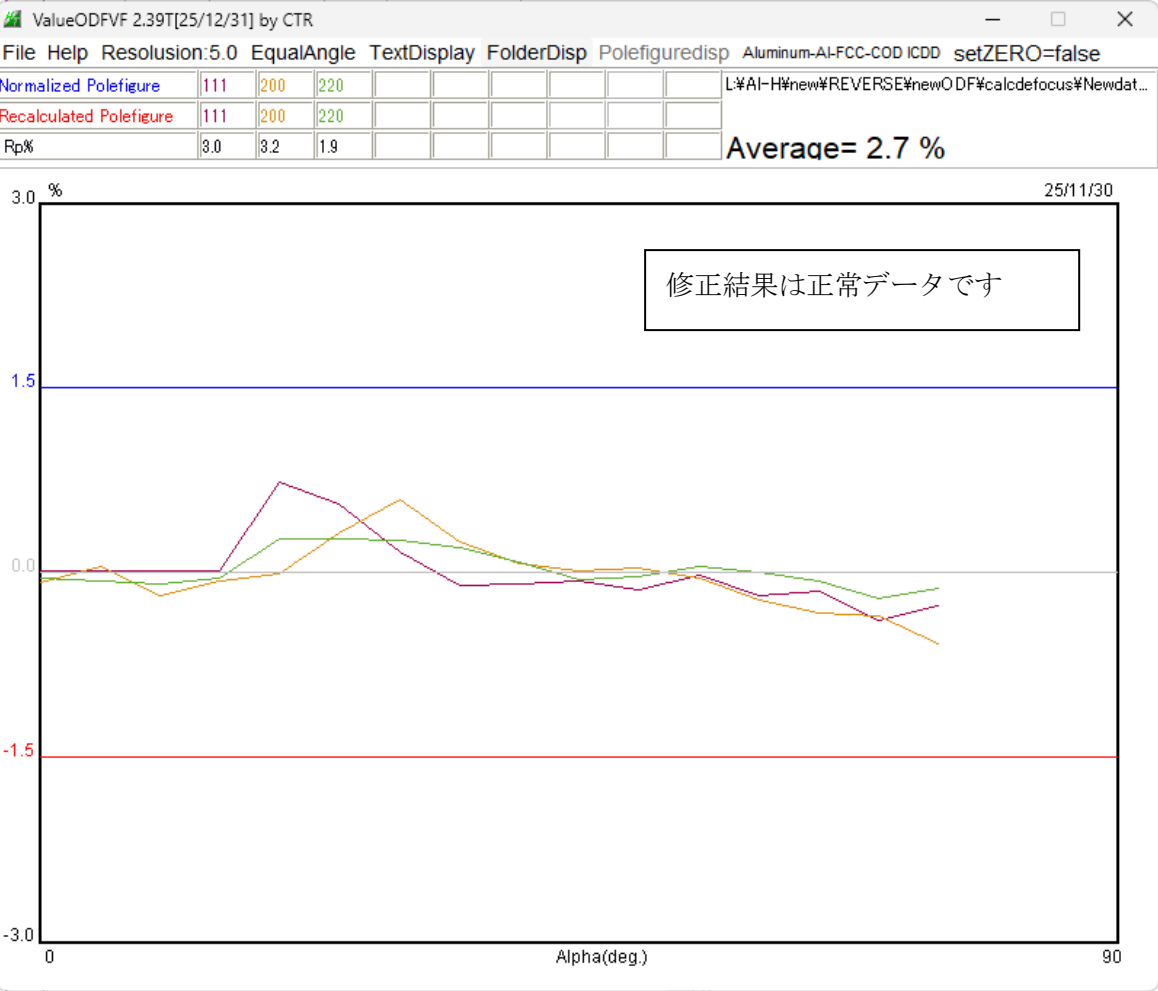
結晶相: Al

最大繰り返し数: 10

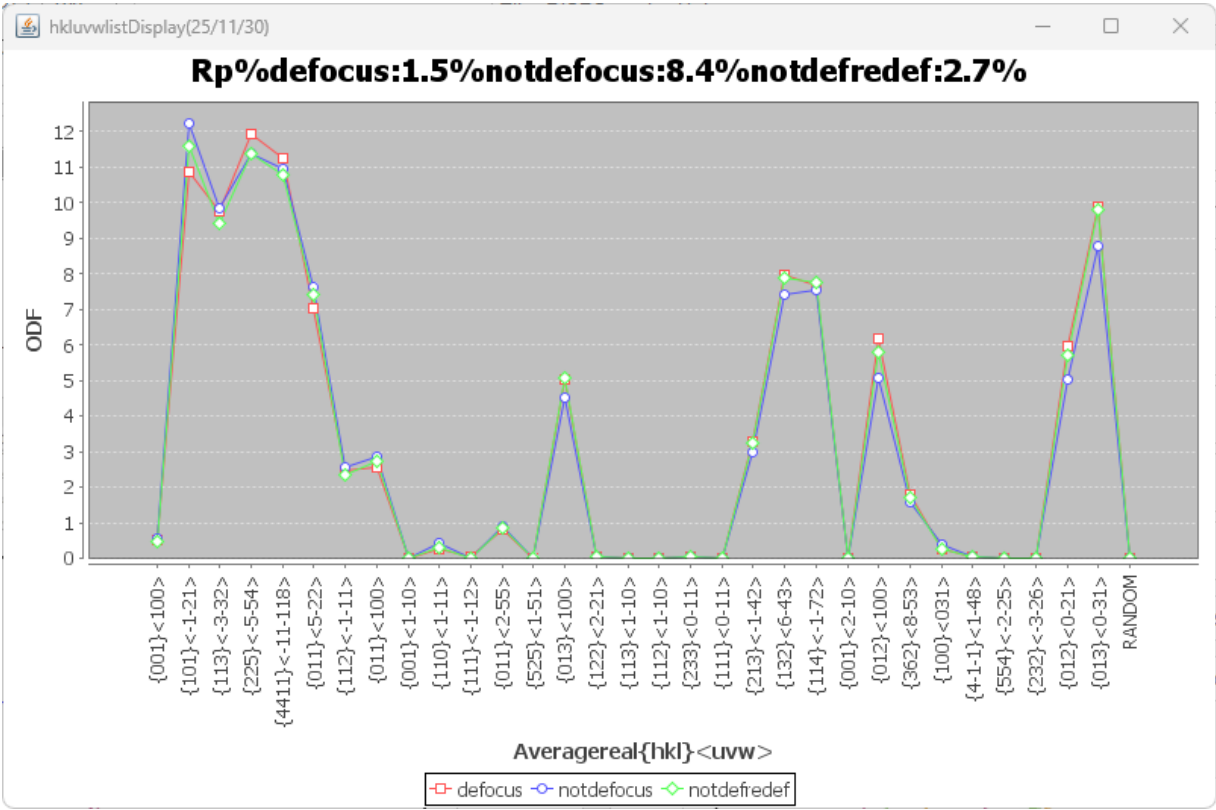
ε = 0.0100

バックグラウンドをフィッティング: ☐

RP因子=9.21 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算



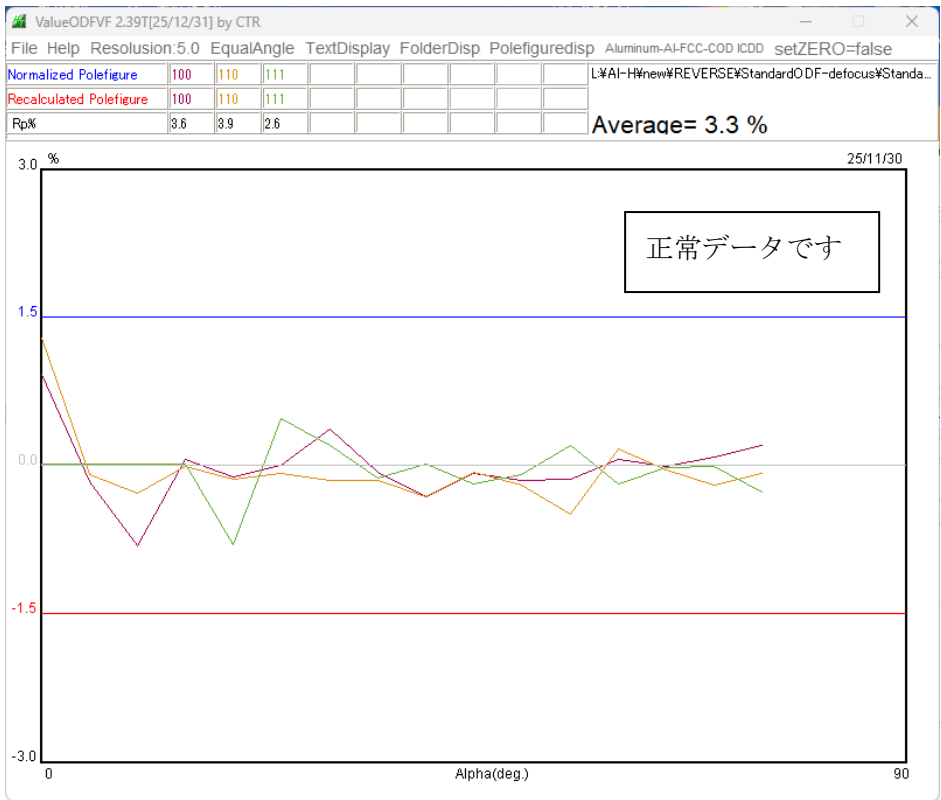
5. 4 newODFによる方位密度比較



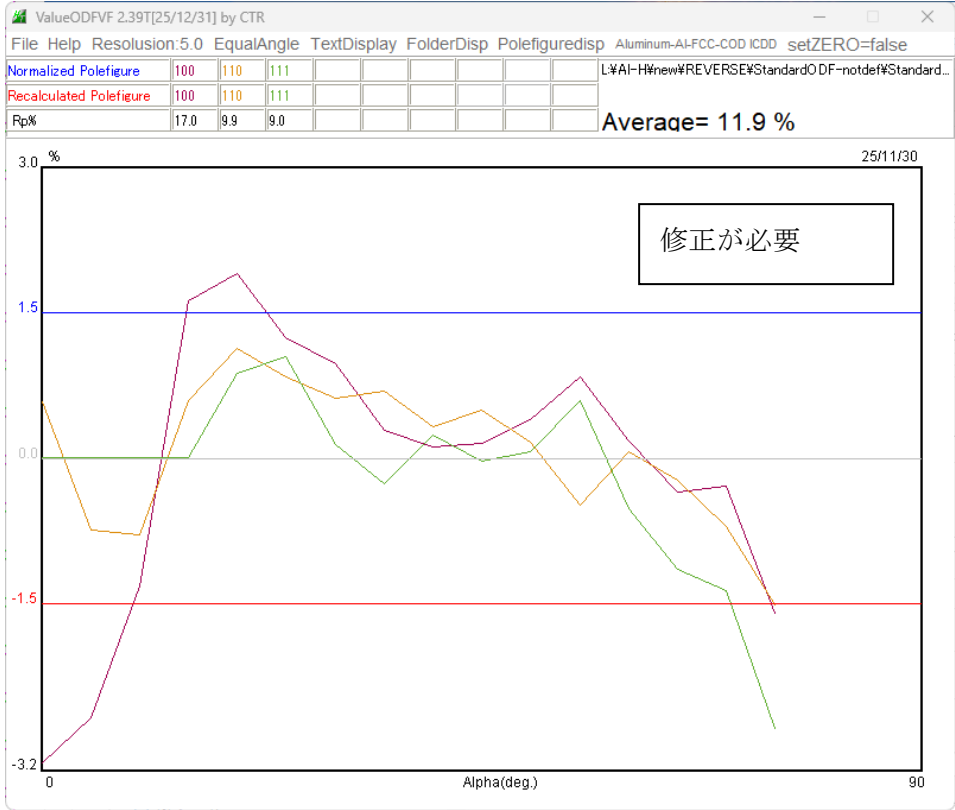
6. StandardODFの場合

StandardODFではRp%の出力はありません。
よって、どの程度のデータ解析であるか、指標はありません。
ValueODFVFソフトウェアによる評価になります。

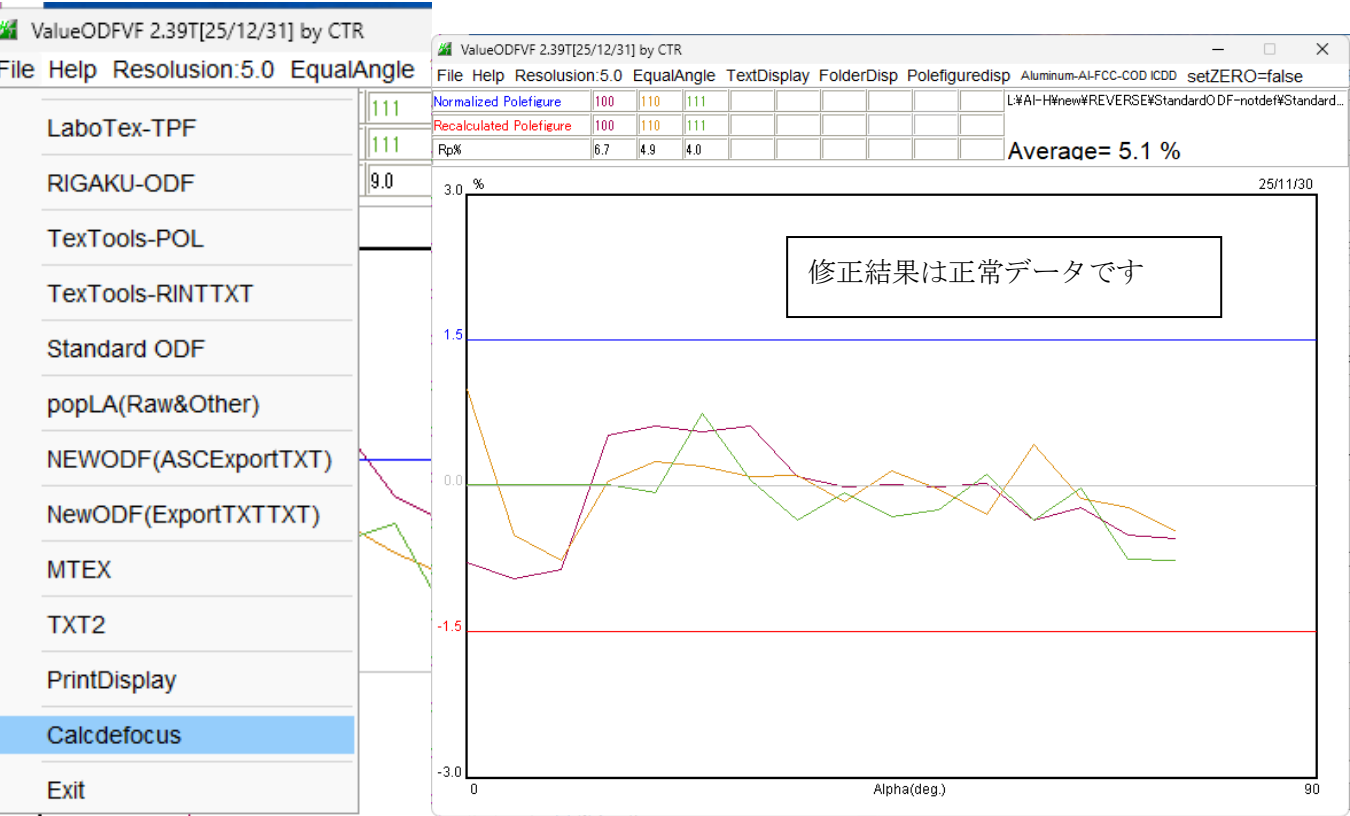
6. 1 defocus 補正処理結果



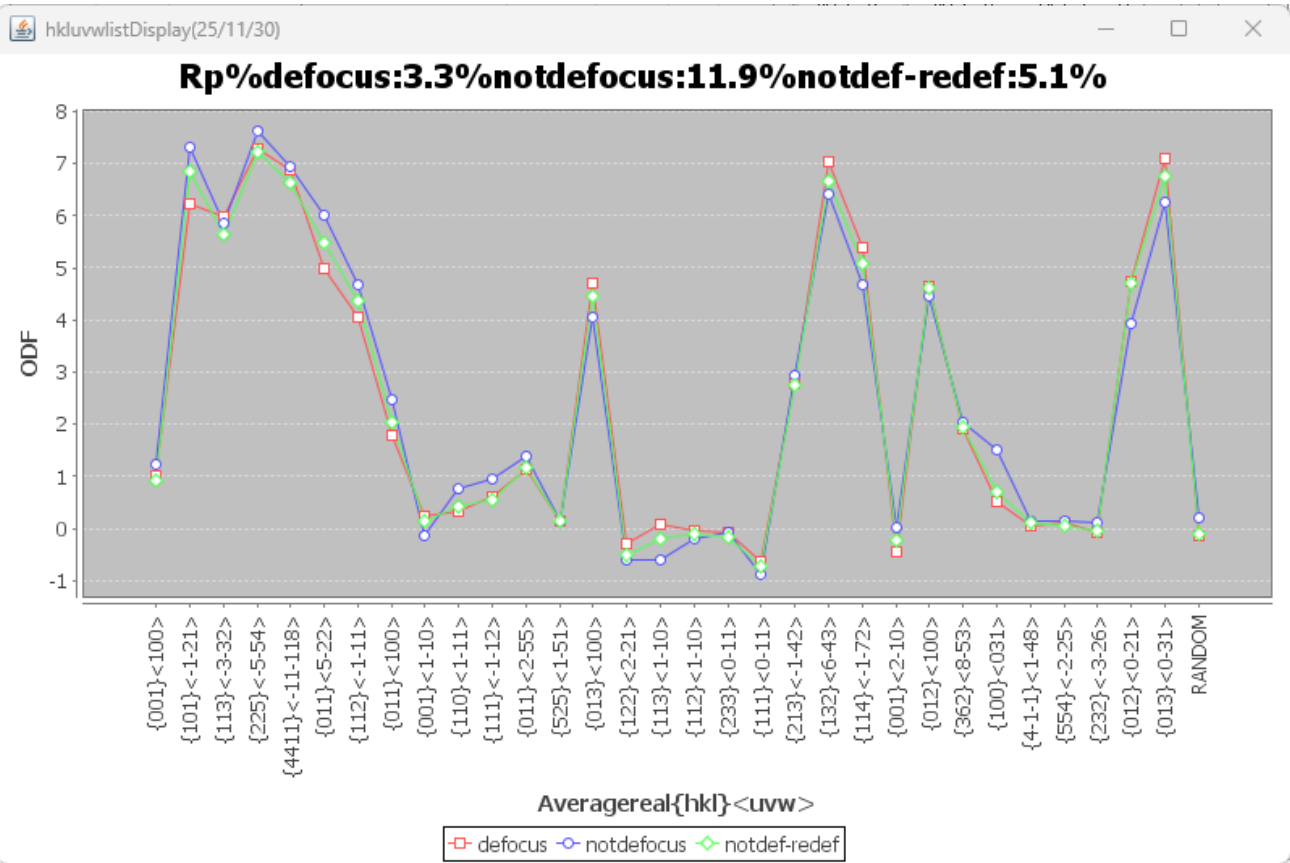
6. 2 defocus 補正なし



6. 3 ValueODFVFによるdefocus補正



6. 4 StandardODFによる方位密度比較



7. まとめ

粒径が細かければ、`defocus`補正することで $R_p\%$ プロファイルは $\pm 1.5\%$ 以内を示すが、`defocus`補正なしでは $R_p\%$ プロファイルは $\pm 1.5\%$ 以内にならない。

しかし、ODF解析結果から`defocus`補正を行うことで、 $R_p\%$ プロファイルは改善される。

粒径が粗い場合、入力極点図の凸凹で $R_p\%$ プロファイルが $\pm 1.5\%$ を大きく外れる事があり ODF 評価は難しくなります。