

ODF解析時のR_p%評価法

2025年11月30日
Helper Tex 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。

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

where :

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

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

$\{PF_{\text{calc.}}\}_i$ - 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、

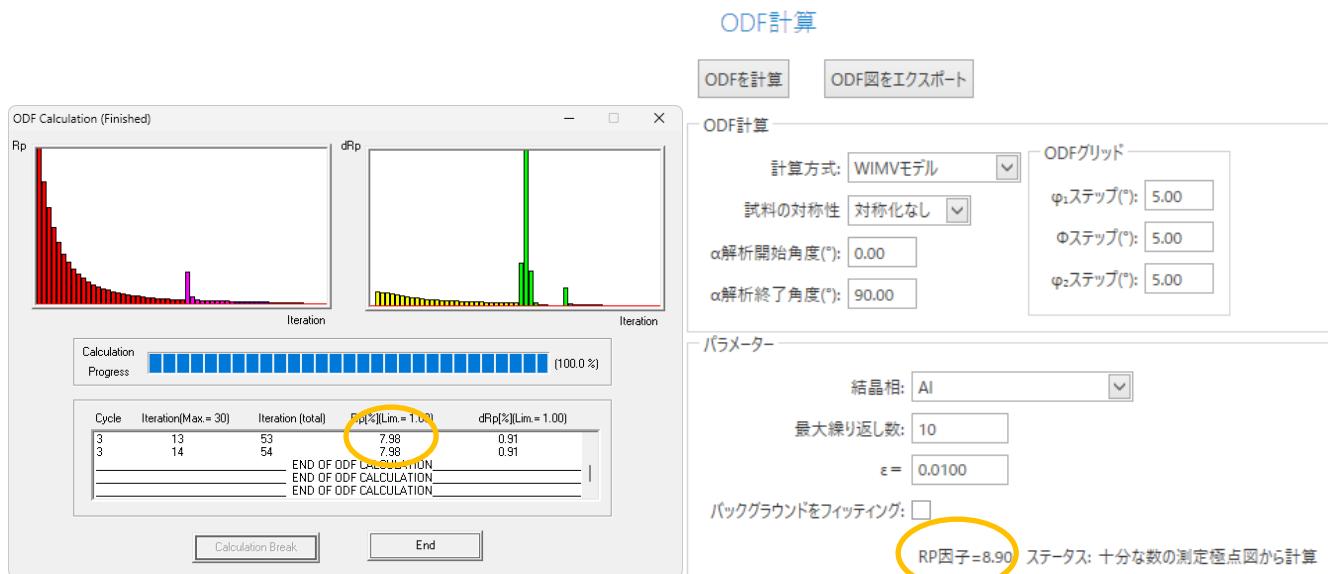
defocus補正なし

defocus補正あり

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

Labo TexのRp%

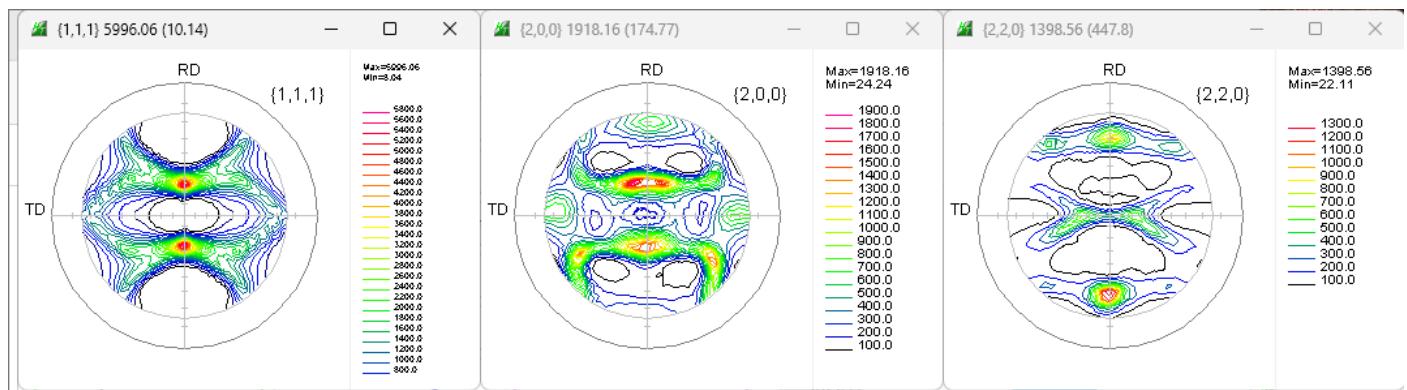
new ODFのRp%



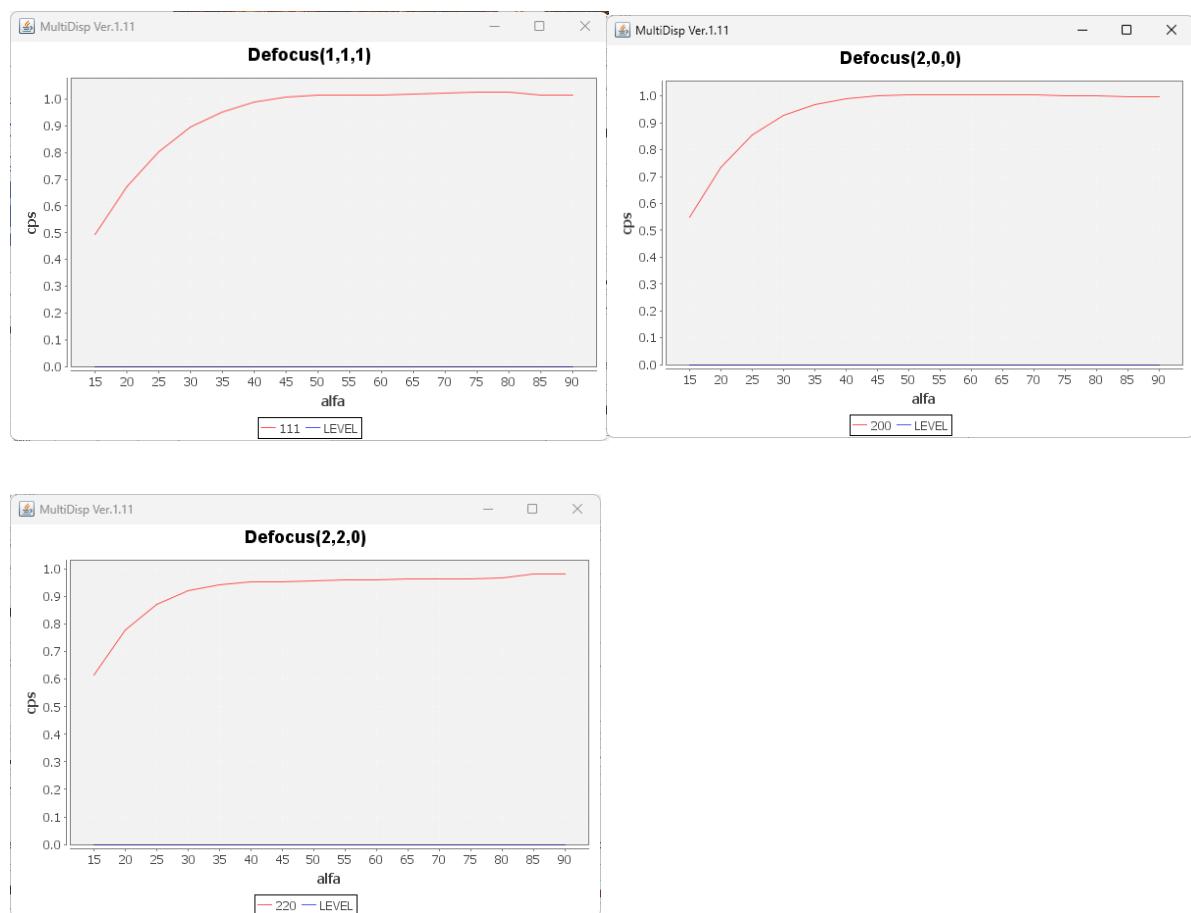
このRp%が何を意味するのか？

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

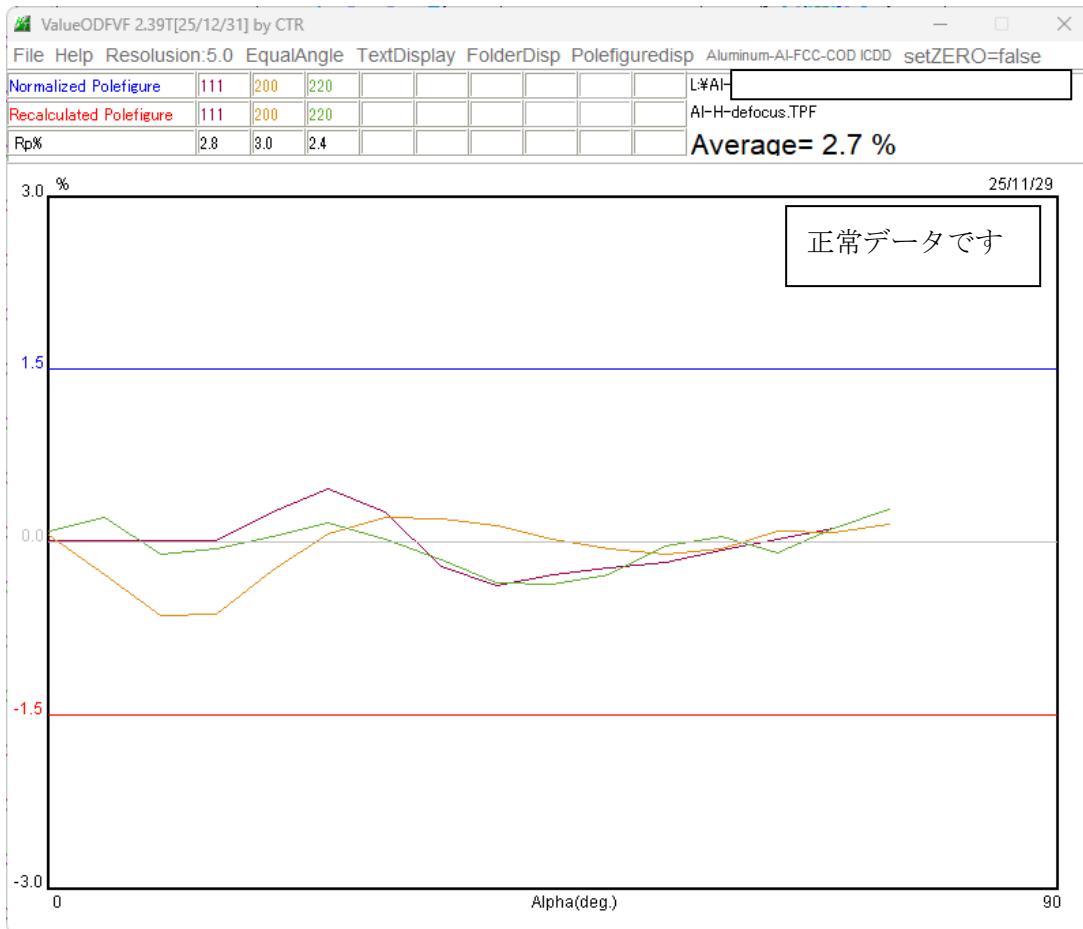
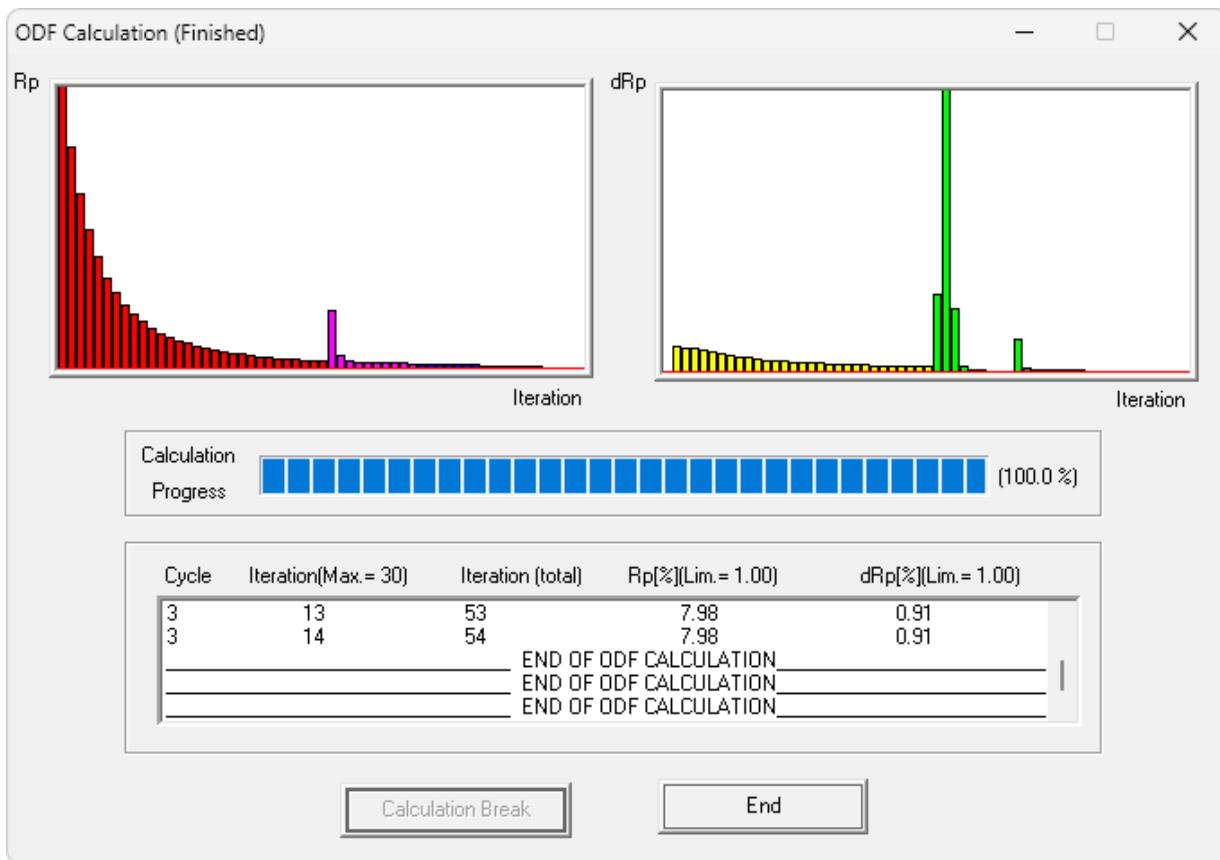


3. defocus



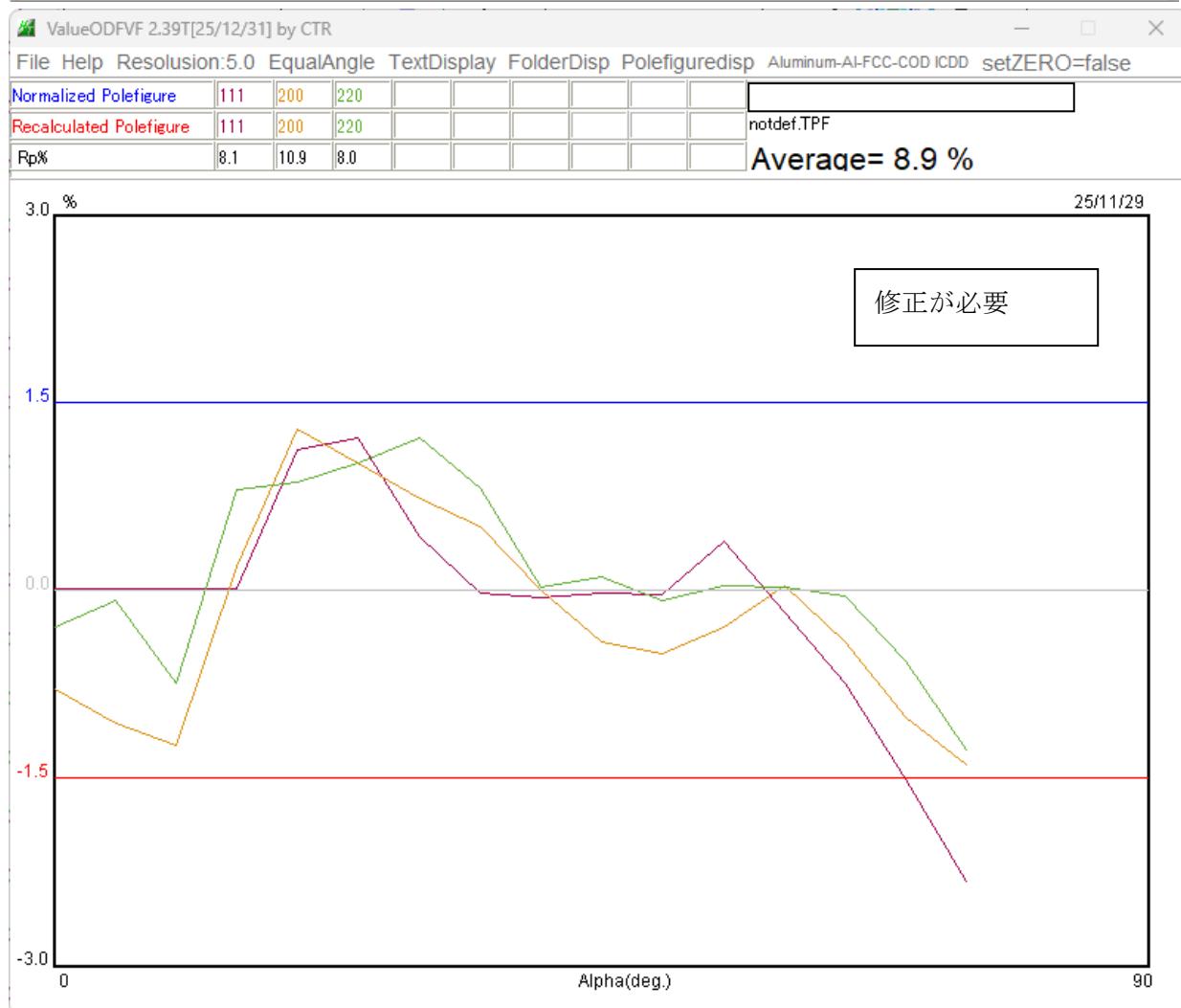
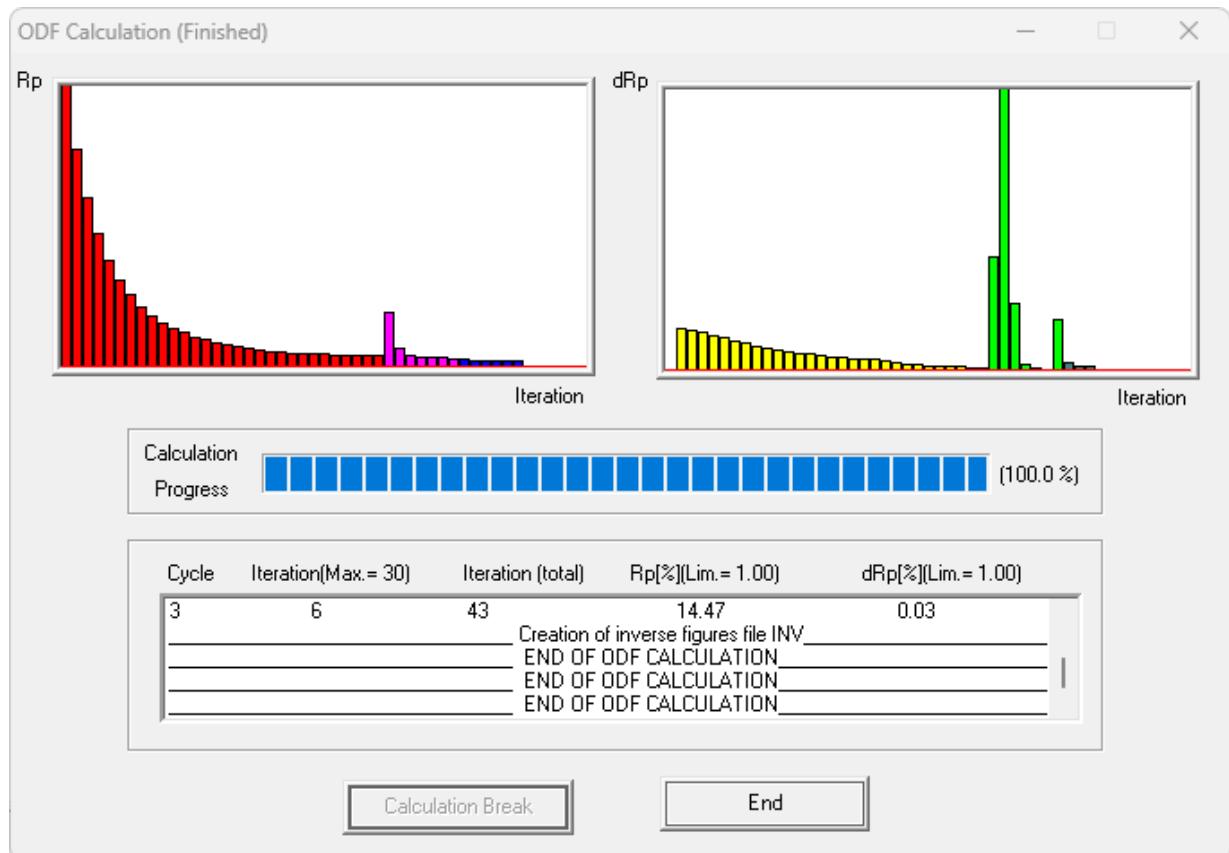
4. LaboTeX の場合

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。

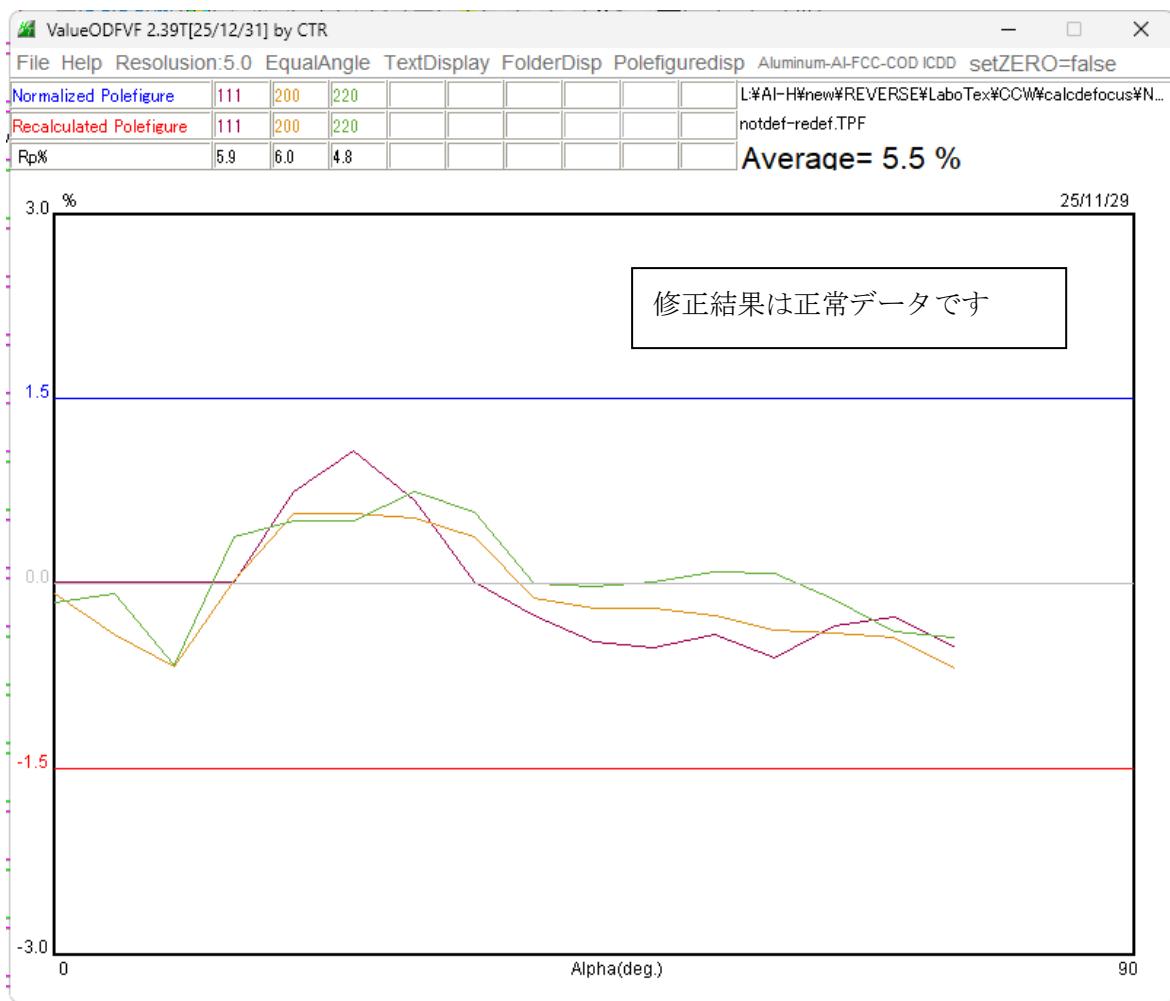
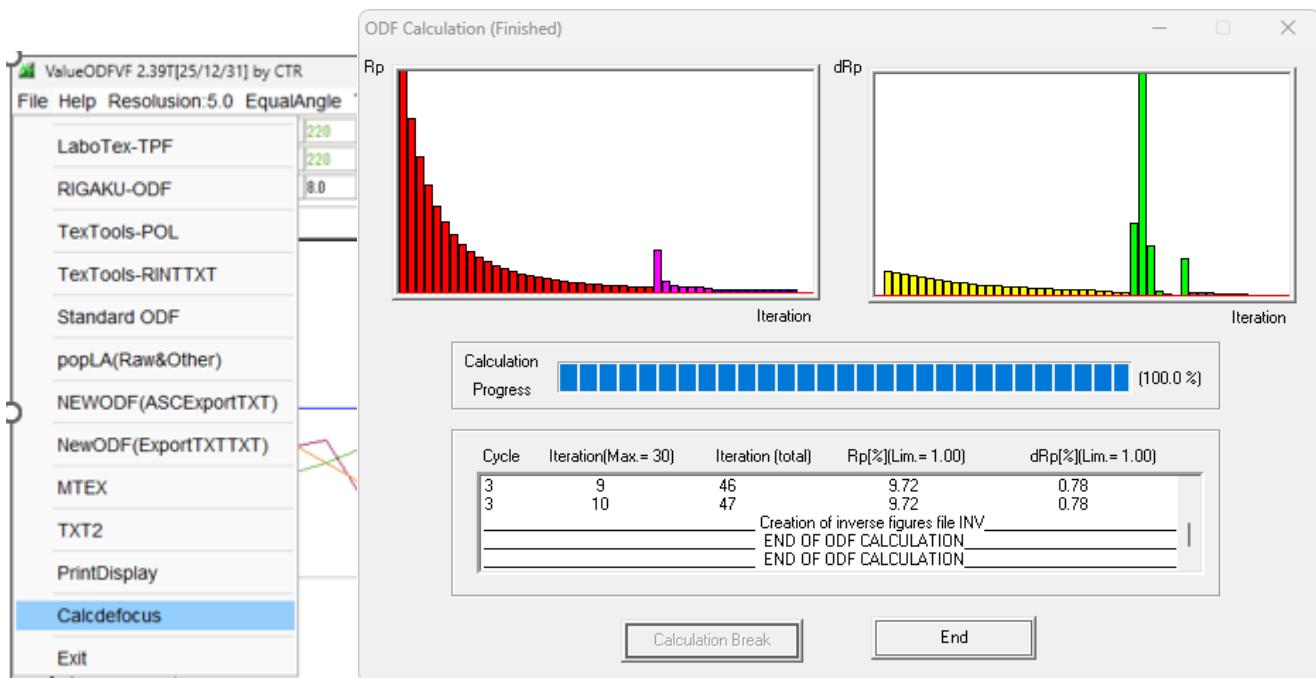
4. 2 d e f o c u s 補正なし



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

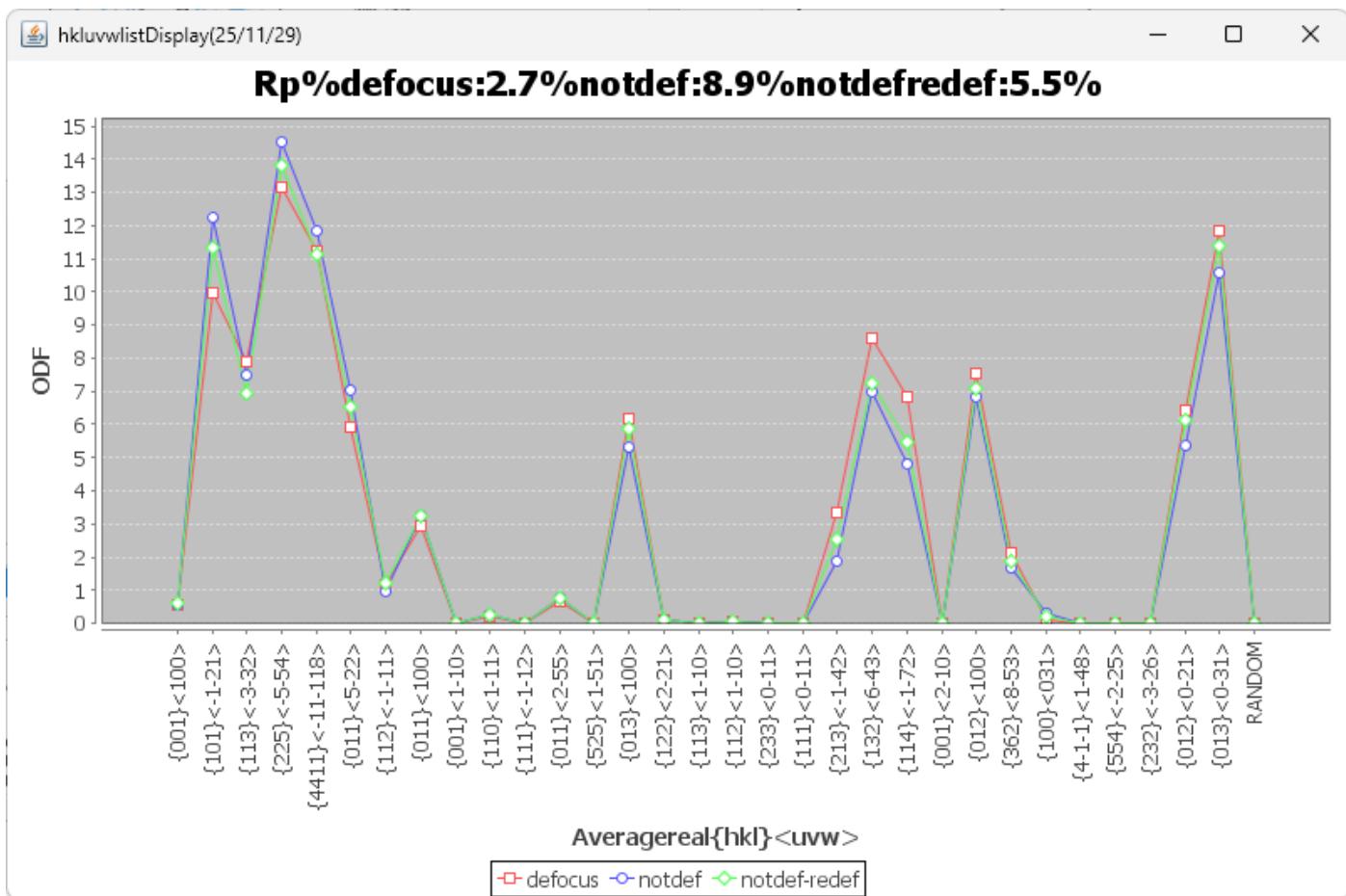
4. 3 ValueODFVFによるdefocus補正

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が改善される。

4. 4 Labo Texによる方位密度比較



5. new ODFの場合 (Smart Lab)

5. 1 d e f o c u s 補正處理結果

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
 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
 $\varepsilon = 0.0100$

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

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

File Help Resolution:5.0 EqualAngle TextDisplay FolderDisp Polefiguredisp Aluminum-Al-FCC-COD ICDD setZERO=false

Normalized Polefigure	111	200	220							L:¥AI-H¥new¥REVERSE¥newODF
Recalculated Polefigure	111	200	220							
Rp%	1.6	2.0	0.9							Average= 1.5 %

25/11/30

正常データです

Alpha(deg.)

5. 2 defocus 補正なし

ODF計算

ODFを計算 ODF図をエクスポート

ODF計算

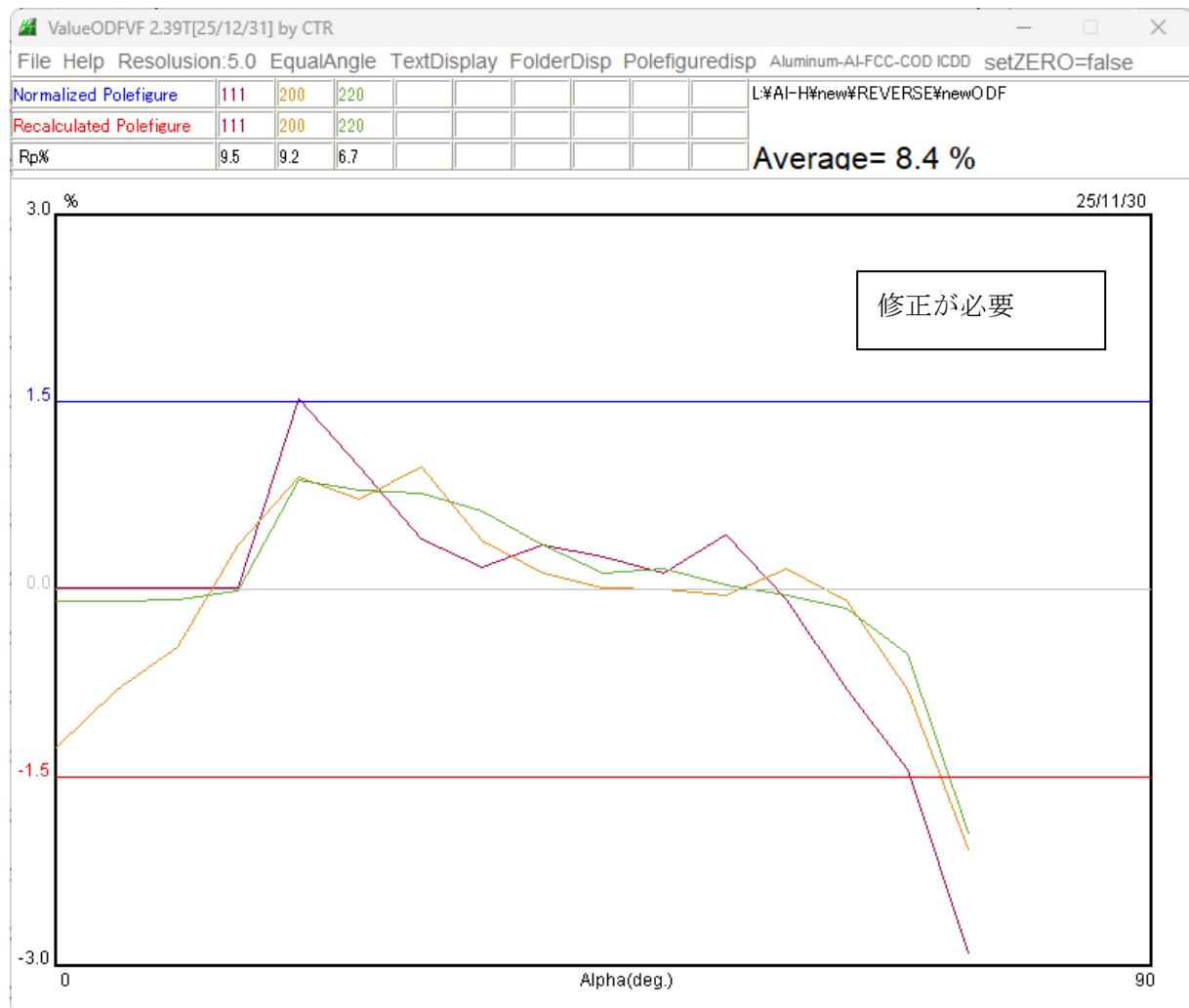
計算方式: <input style="border: 1px solid #ccc; padding: 2px 10px; width: 100%;" type="button" value="WIMVモデル"/>	ODFグリッド
試料の対称性 <input style="border: 1px solid #ccc; padding: 2px 10px; width: 100%;" type="button" value="対称化なし"/>	φ_1 ステップ(°): <input type="text" value="5.00"/>
α 解析開始角度(°): <input type="text" value="0.00"/>	Φ ステップ(°): <input type="text" value="5.00"/>
α 解析終了角度(°): <input type="text" value="90.00"/>	φ_2 ステップ(°): <input type="text" value="5.00"/>

パラメーター

結晶相: <input style="border: 1px solid #ccc; padding: 2px 10px; width: 100%;" type="button" value="Al"/>	最大繰り返し数: <input type="text" value="10"/>
$\varepsilon = 0.0100$	

バックグラウンドをフィッティング:

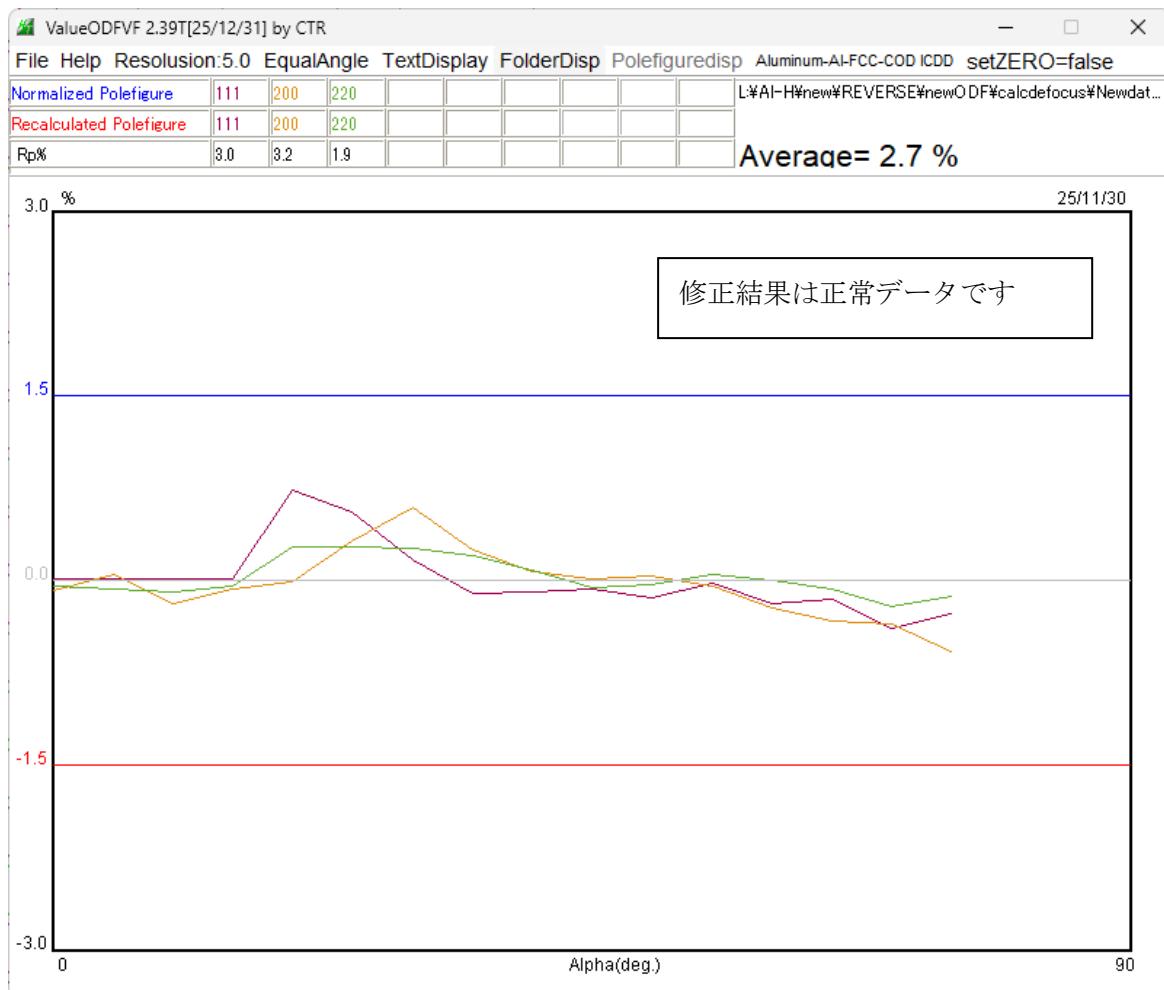
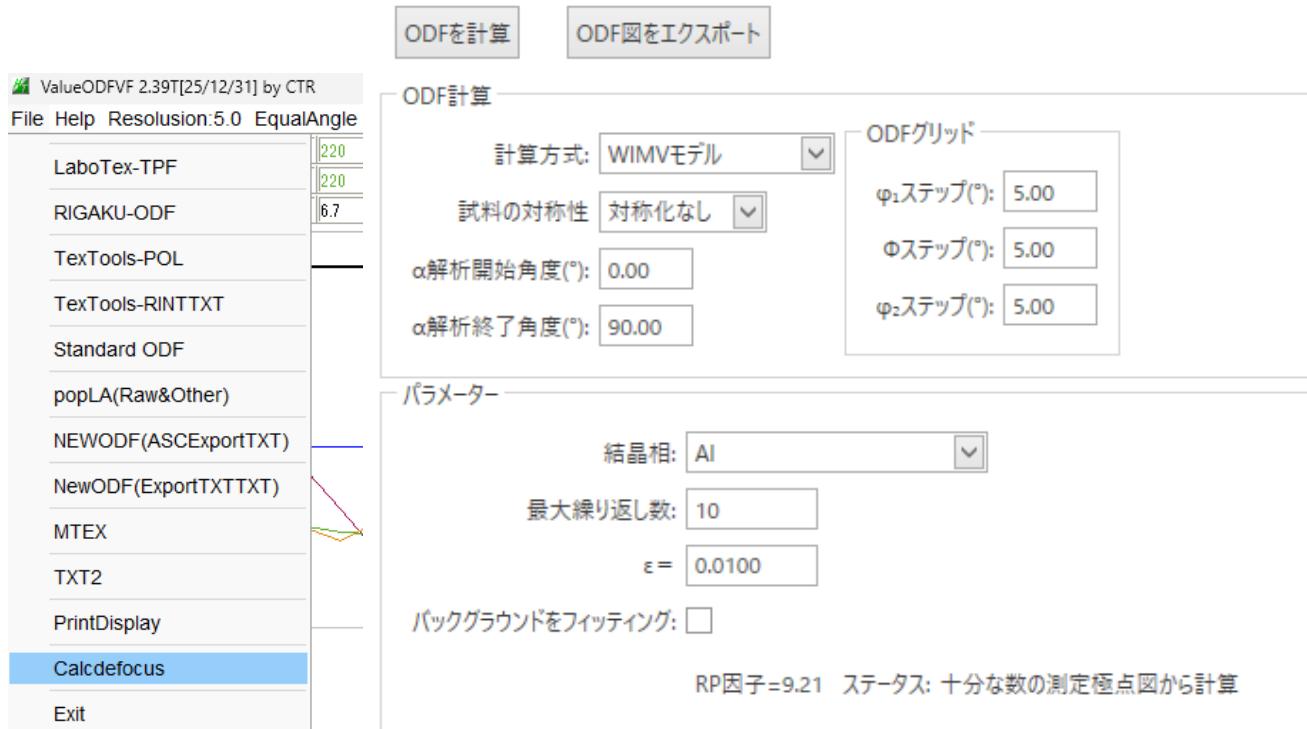
RP因子=14.72 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算



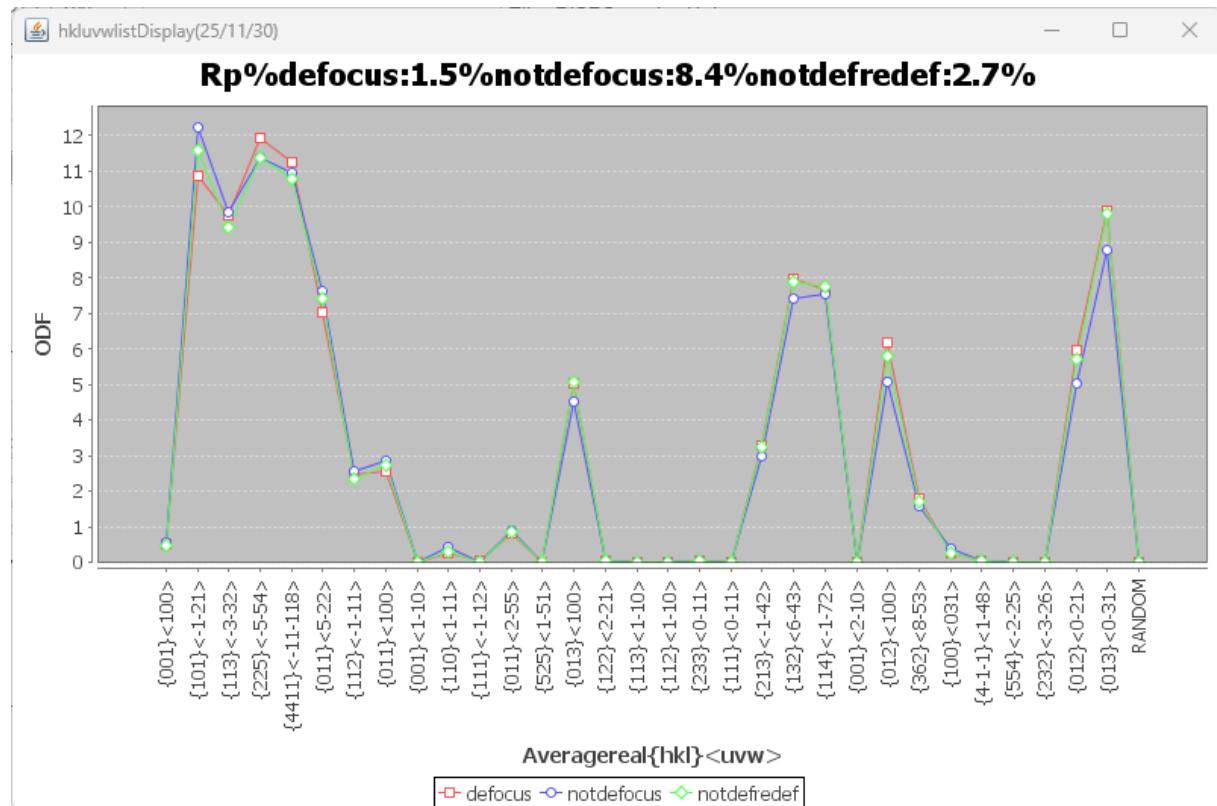
5. 3 ValueODFVFによるdefocus補正

defocus補正なし結果からdefocus曲線を計算

ODF計算



5. 4 newODFによる方位密度比較



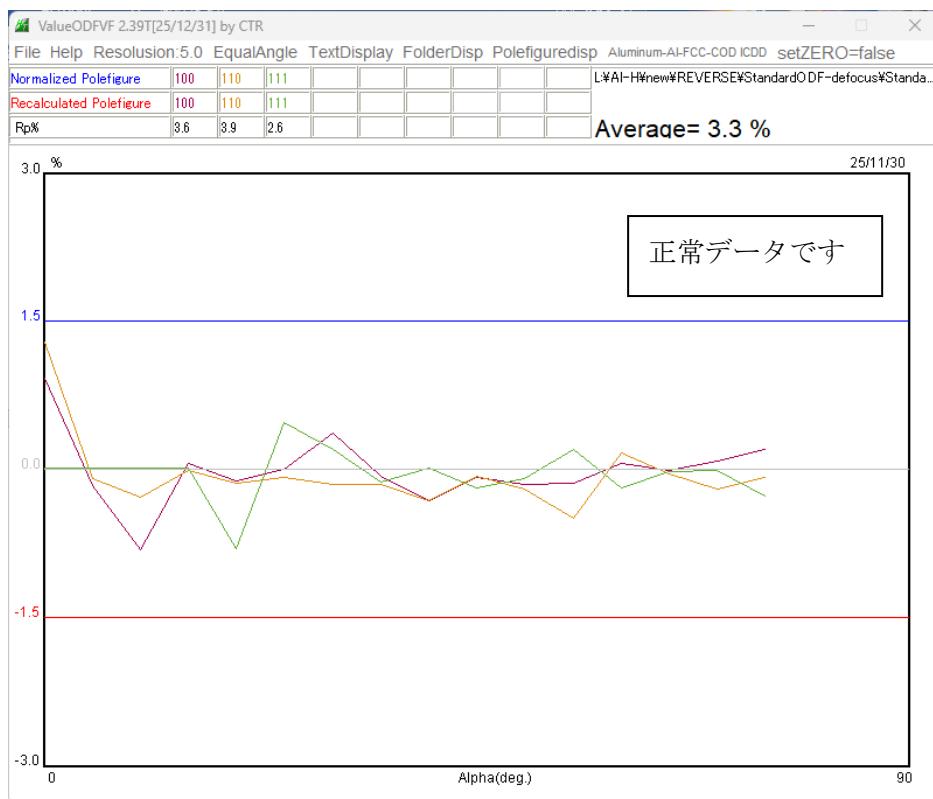
6. Standard ODFの場合

Standard ODFではRp%の出力はありません。

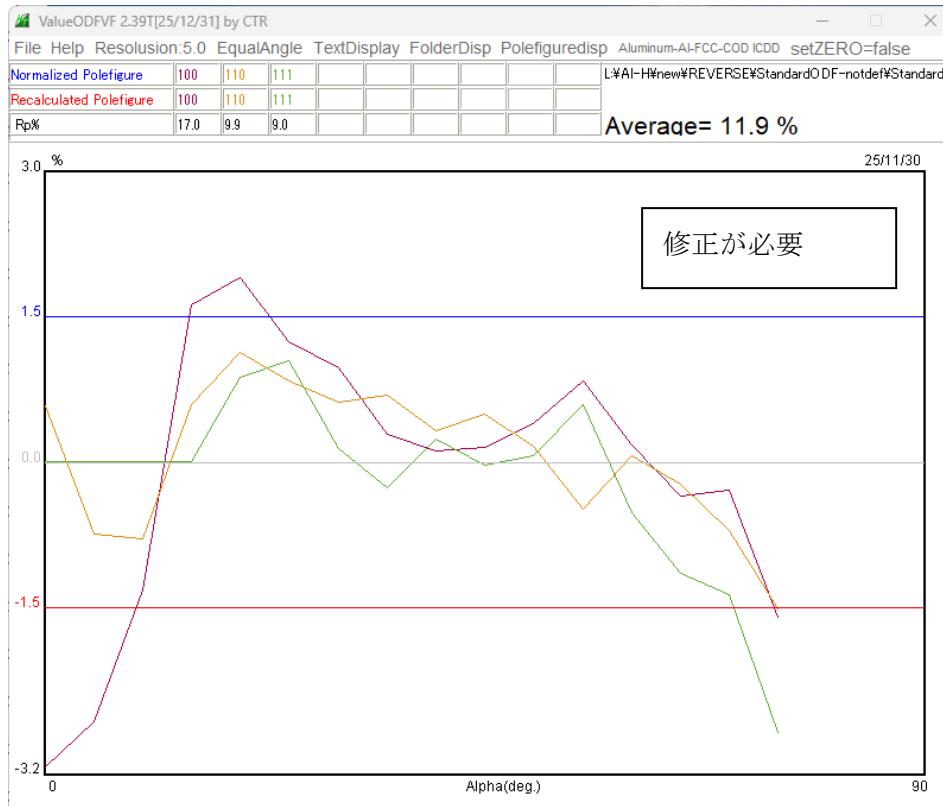
よって、どの程度のデータ解析であるか、指標はありません。

ValueODFVFソフトウェアによる評価になります。

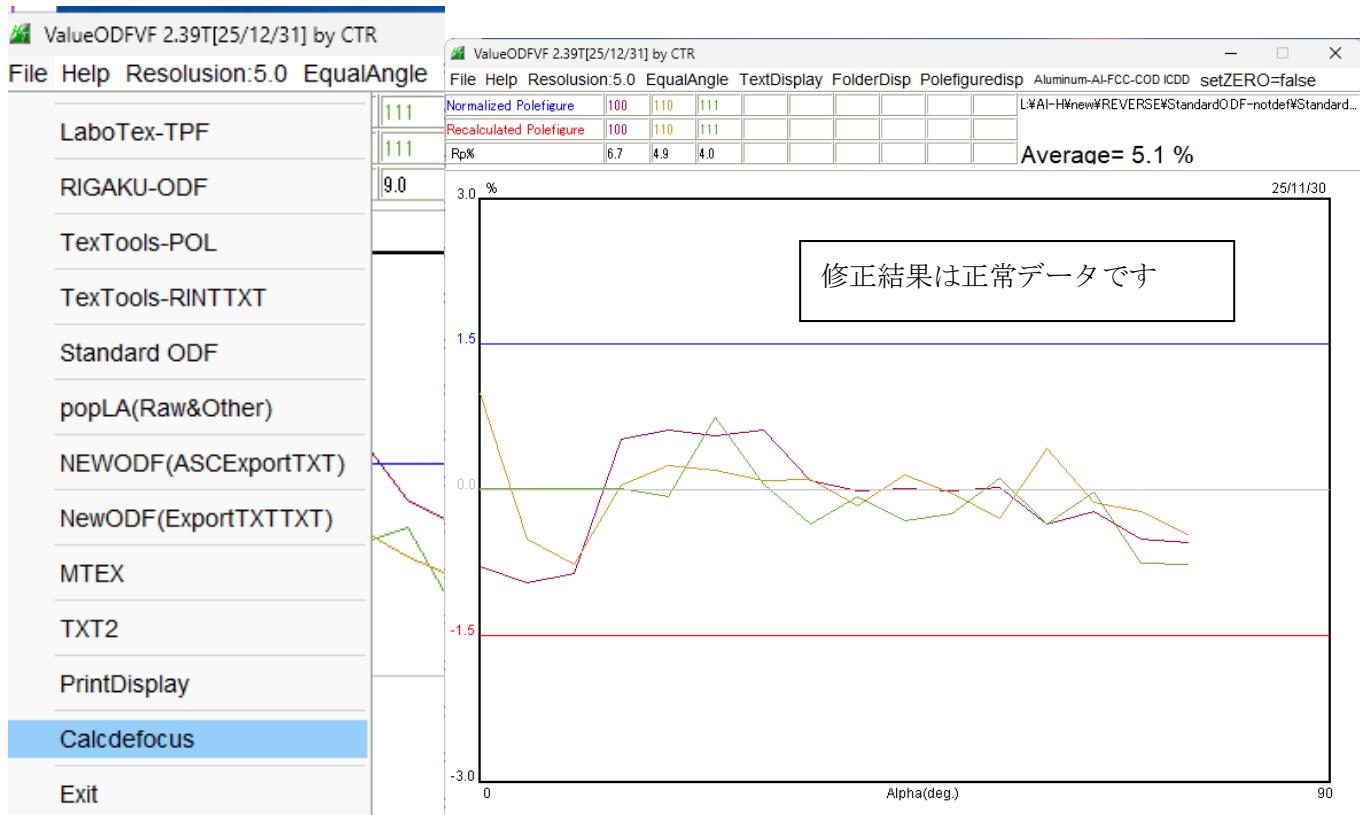
6. 1 de focus 補正處理結果



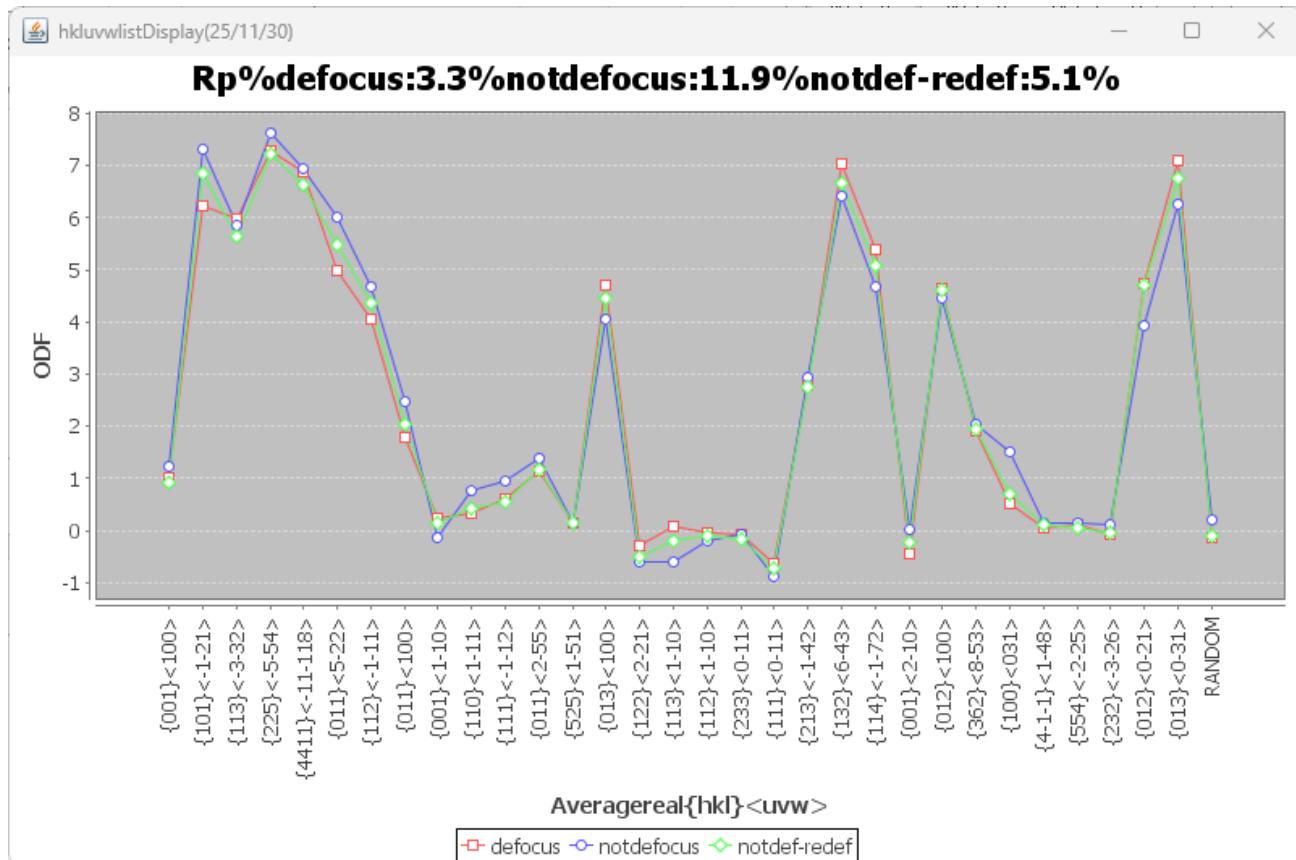
6. 2 defocus補正なし



6. 3 ValueODFVFによるdefocus補正



6. 4 Standard ODF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Rp%プロファイルは±1.5%以内を示すが、`defocus`補正なしではRp%プロファイルは±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、Rp%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Rp%プロファイルが±1.5%を大きく外れる事があり
ODF評価は難しくなります。