

## V a l u e O D F V F ソフトウェアによる d e f o c u s 補正

ODF 解析結果の再評価で正しいODF 解析データが求まります。

2019年09月03日

*HelperTex Office*

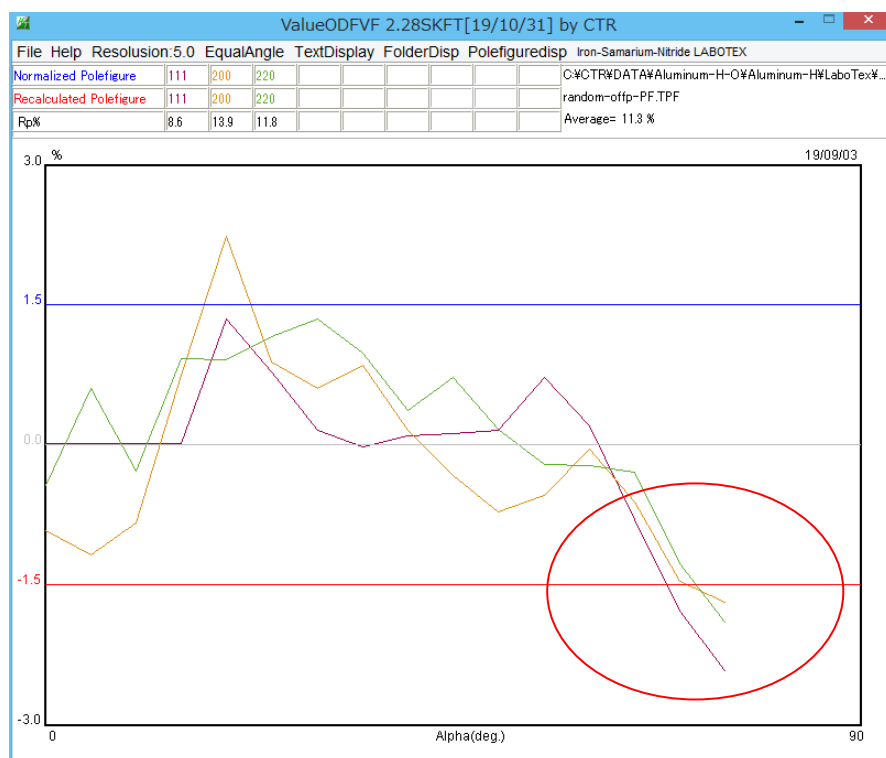
## 概要

XRD極点図のdefocus補正は、無配向試料による極点図から極点処理で補正が行われる。無配向試料が得られない場合、ODFPoleFigure2ソフトウェアによる計算defocus補正が行われている。

defocus補正を行っても、ODF解析後、ValueODFVFソフトウェアによるRp%解析ではdefocusに起因するErrorが観察される場合がある。

どちらの場合でも、ODF解析の正解を、Rp%が小さく、ODF最大方位密度が大きいとした場合、測定データの再評価を行わなければなりません。

この再評価のツールとしてValueODFVFソフトウェアに機能を追加しました。



random 補正なしの Rp%

Rp%プロファイルの右側が±1.5%をはみ出す場合 ValueODFVF の再 defocus 機能で修正可能

以下の説明では ValueODFVF(Ver2.28 以降)を使用します。

ODF は LaboTex を用いました。

## 比較

PoleFigure2 ソフトウェアによる

Random 試料による defocus 補正による ODF 解析

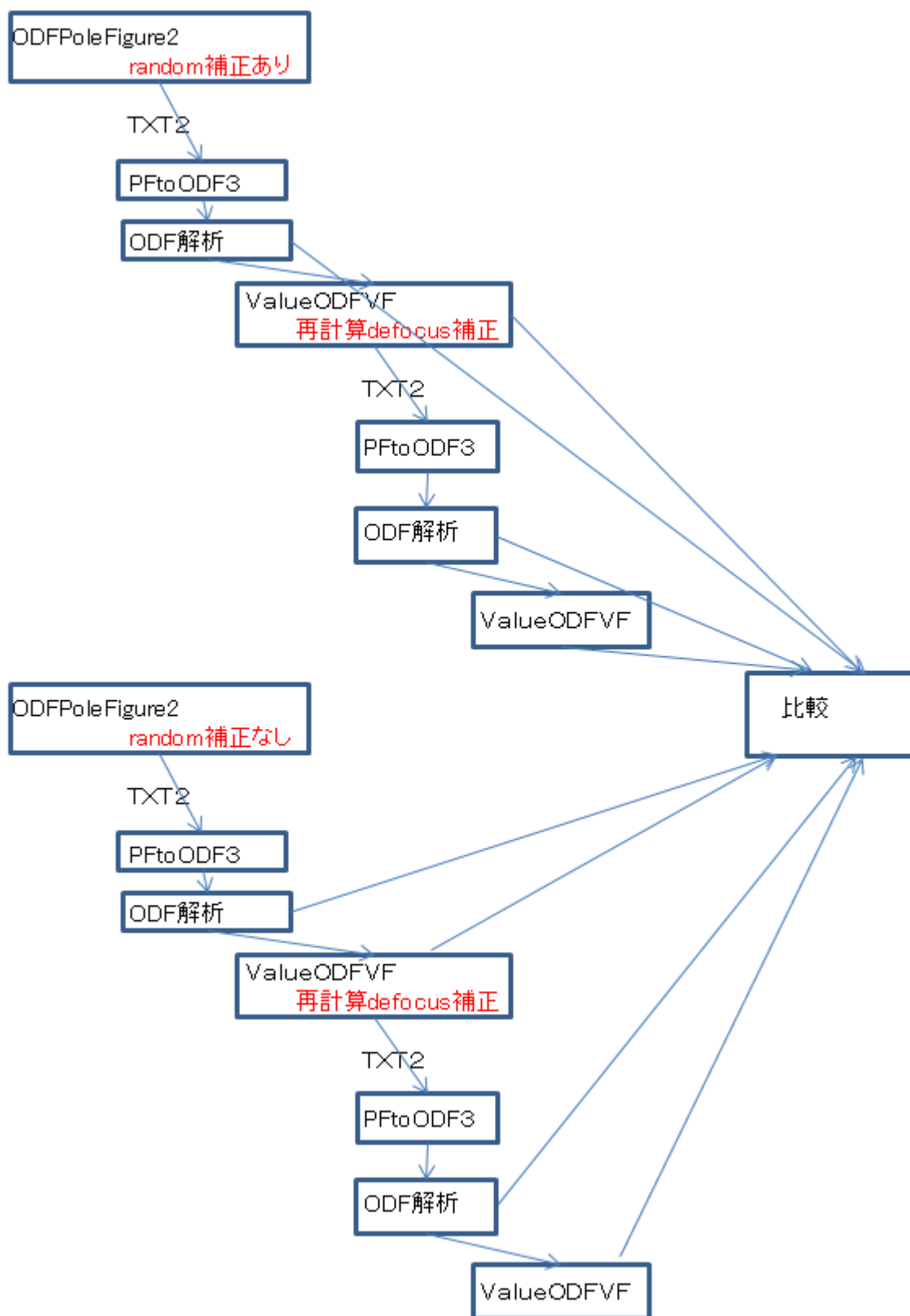
Random 補正なしによる ODF 解析結果から ValueODFVF による calcdefocus 後の ODF 解析

PoleFigure2 ソフトウェアによる

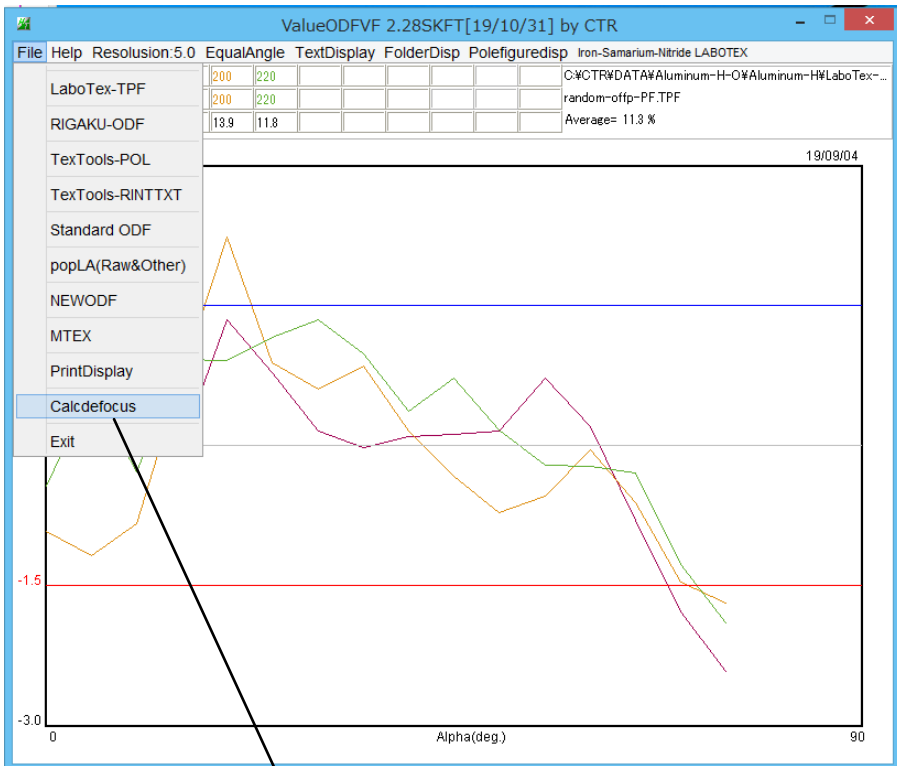
Random 試料による defocus 補正なし ODF 解析

上記結果の ValueODFVF による calcdefocus 後の ODF 解析

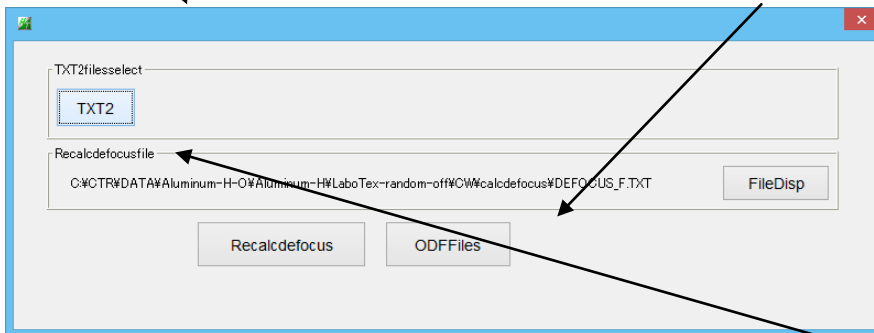
R a n d o m補正結果と補正なしによる ODF 解析結果と ValueODFVF による calcdefocus 後の ODF 解析



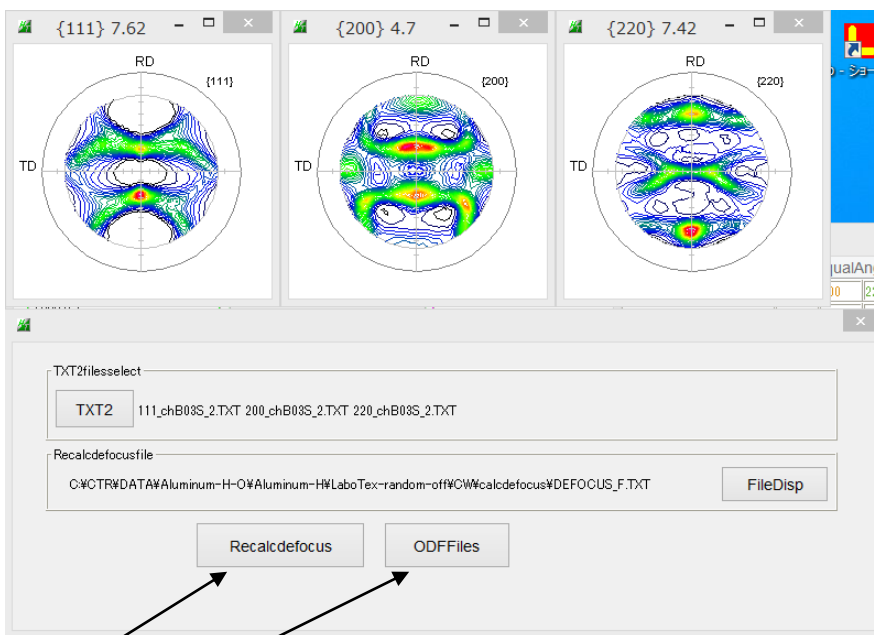
# ValueODFVFの再計算 defocus 機能



選択されたデータからデ計算に使用する defocus 曲線が計算される



ODF 解析に使用した TXT 2 データ (PFtoODF3 への入力データ) を選択



再計算し、ODFFiles で PFtoODF3 ソフトウェアにデータが渡される。  
ODF 計算する。

# ODFPoleFigure2 ソフトウェアによる random 補正

ODFPoleFigure2 3.85SKFT[19/10/31] by CTR

File Linear(absolute)Contour ToolKit Help InitSet BGMode Measure(Calc) Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization

Files select: ASC(RINT-PC) 111.ASC 200.ASC 220.ASC

Calculation Condition: C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-H\111.ASC

Background delete mode:  DoubleMode  SingleMode  LowMode  HighMode  Nothing

Peak slit: 7.0 mm BG Slit: 7.0 mm  PeakSlit / BGS.. BG Scope: 80.0 deg. 90.0 deg.

Defocus(1) functions file: C:\CTR\DATA\AI-powder-random#defocus#DEFOCUS\_F.TXT

hkl: 1,1,1

Free(LimitValue=0.0)

1/Ra Profile

Cancel Calc Connect

Exit&ODF ODF

ValueODFVF... ValueODFVF-A

Select crystal : Trigonal 19/09/03

### ODF Calculation (Finished)

Rp

dRp

Iteration

Iteration

Calculation Progress: (100.0%)

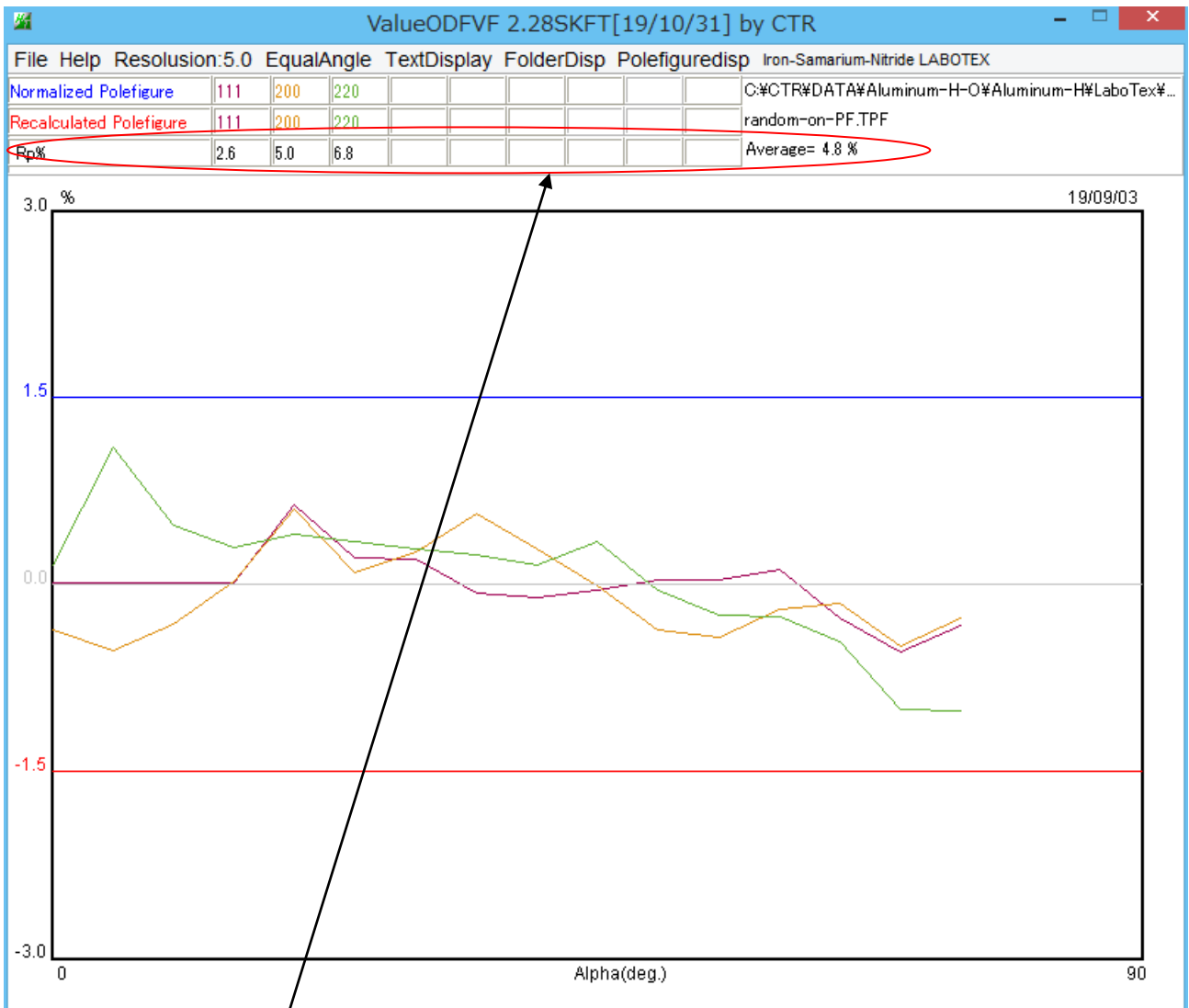
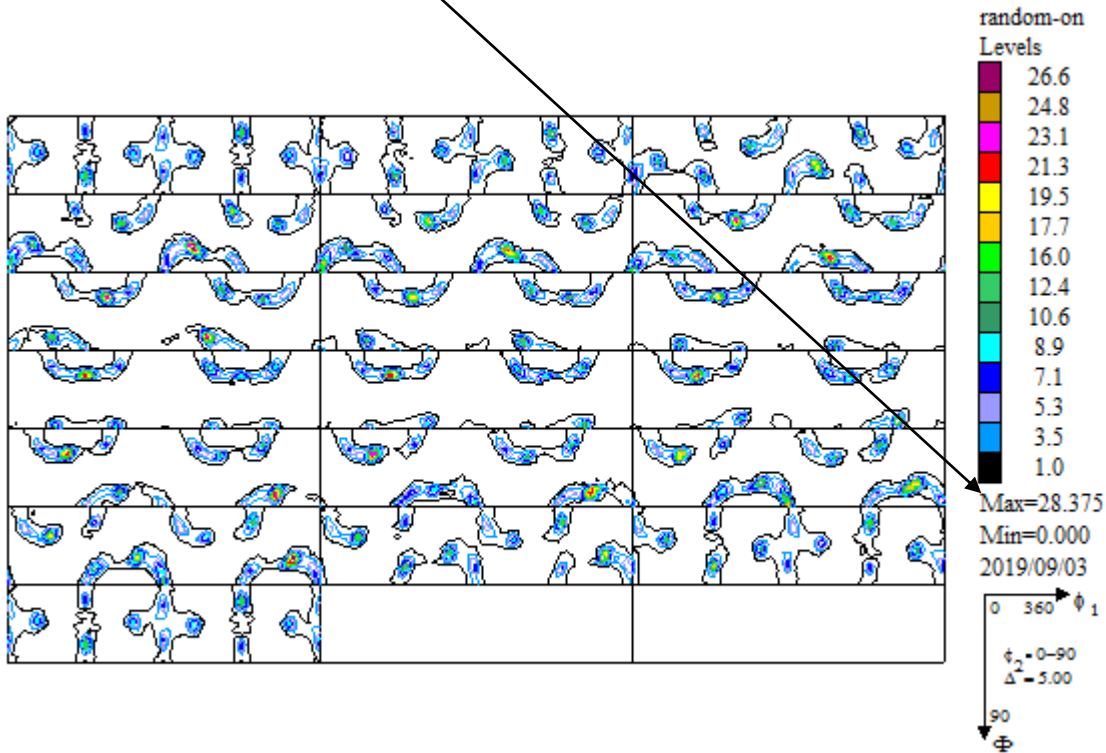
Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 1.00)	dRp[%](Lim. = 1.00)
3	7	45	8.95	1.74
3	8	46	8.87	0.93

Creation of pole figures files NPF and RPF  
 Creation of orientation distribution file ODF  
 Creation of inverse figures file INV

Calculation Break End

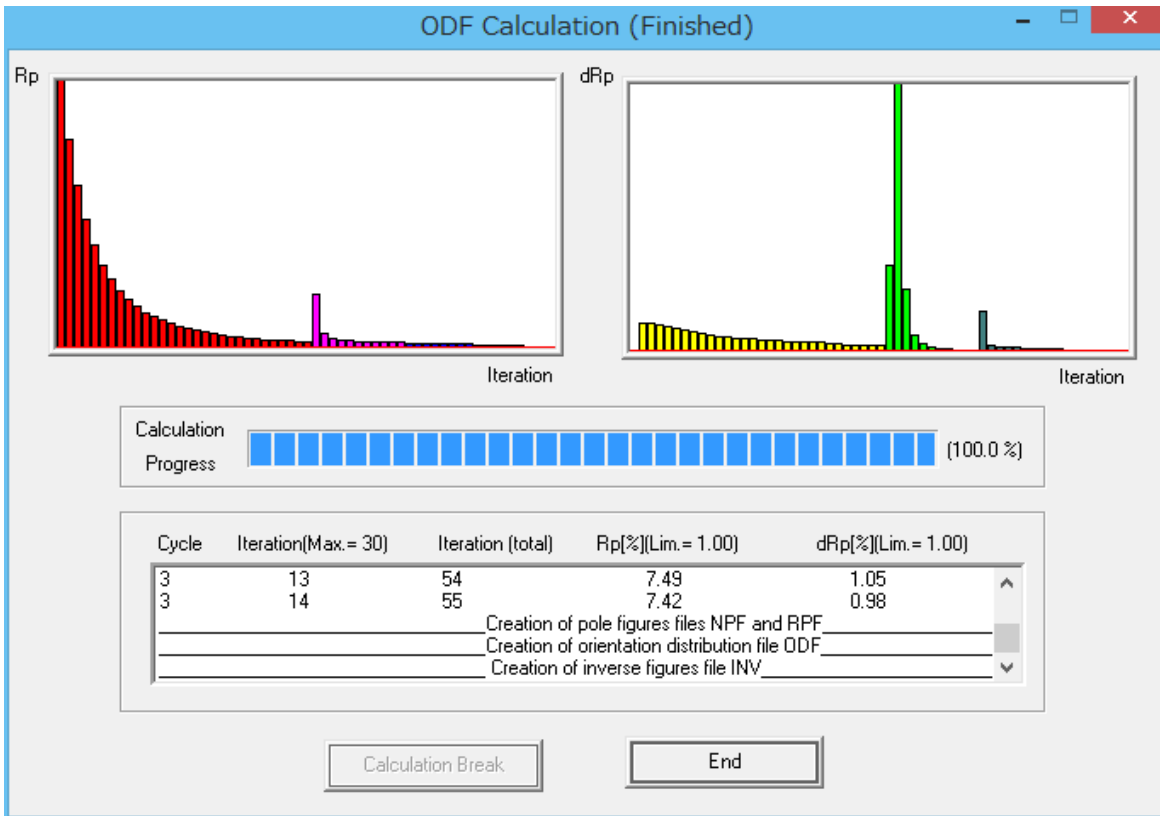
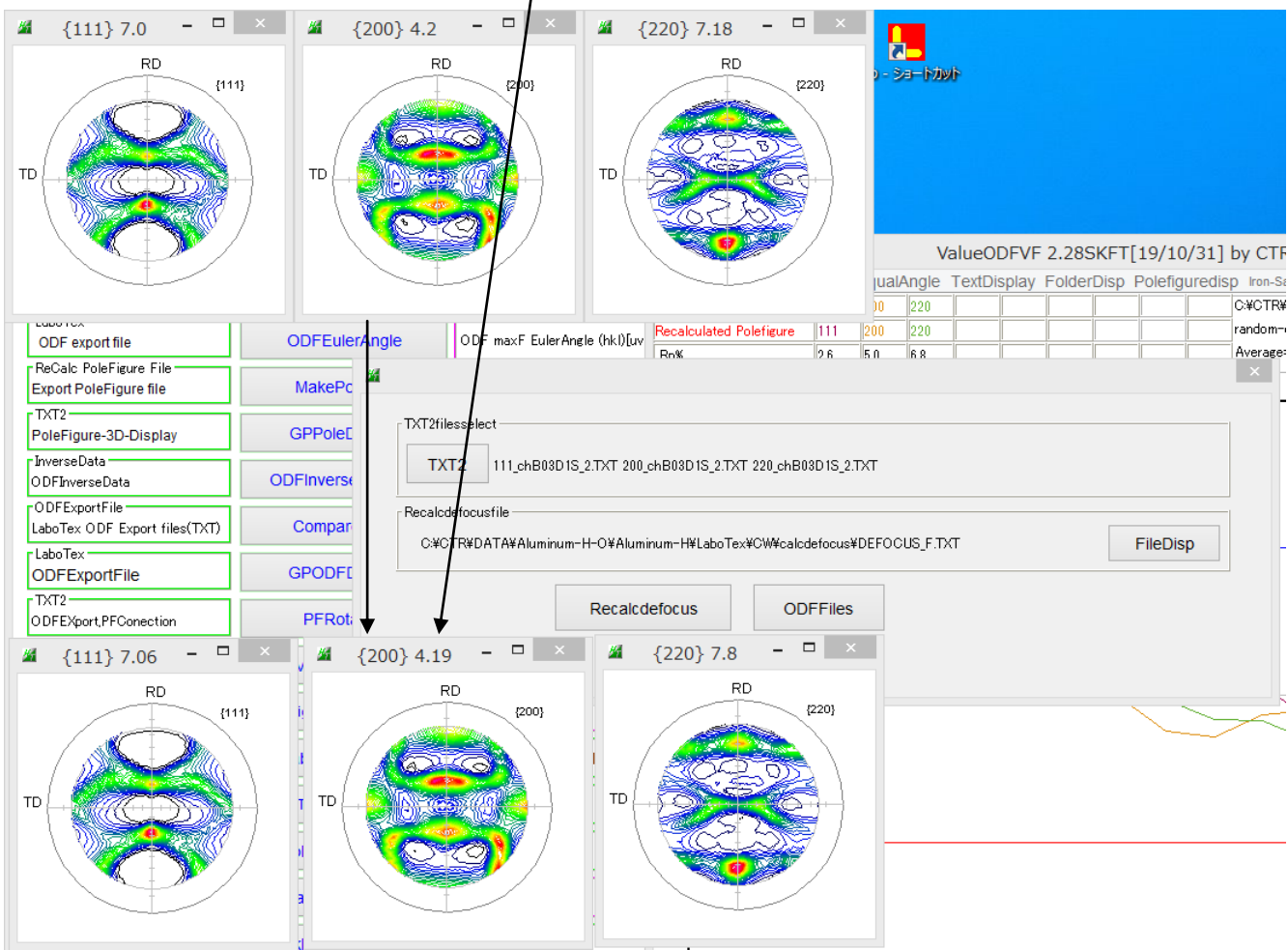
R p % と d R p %

ODF解析の最大方位密度

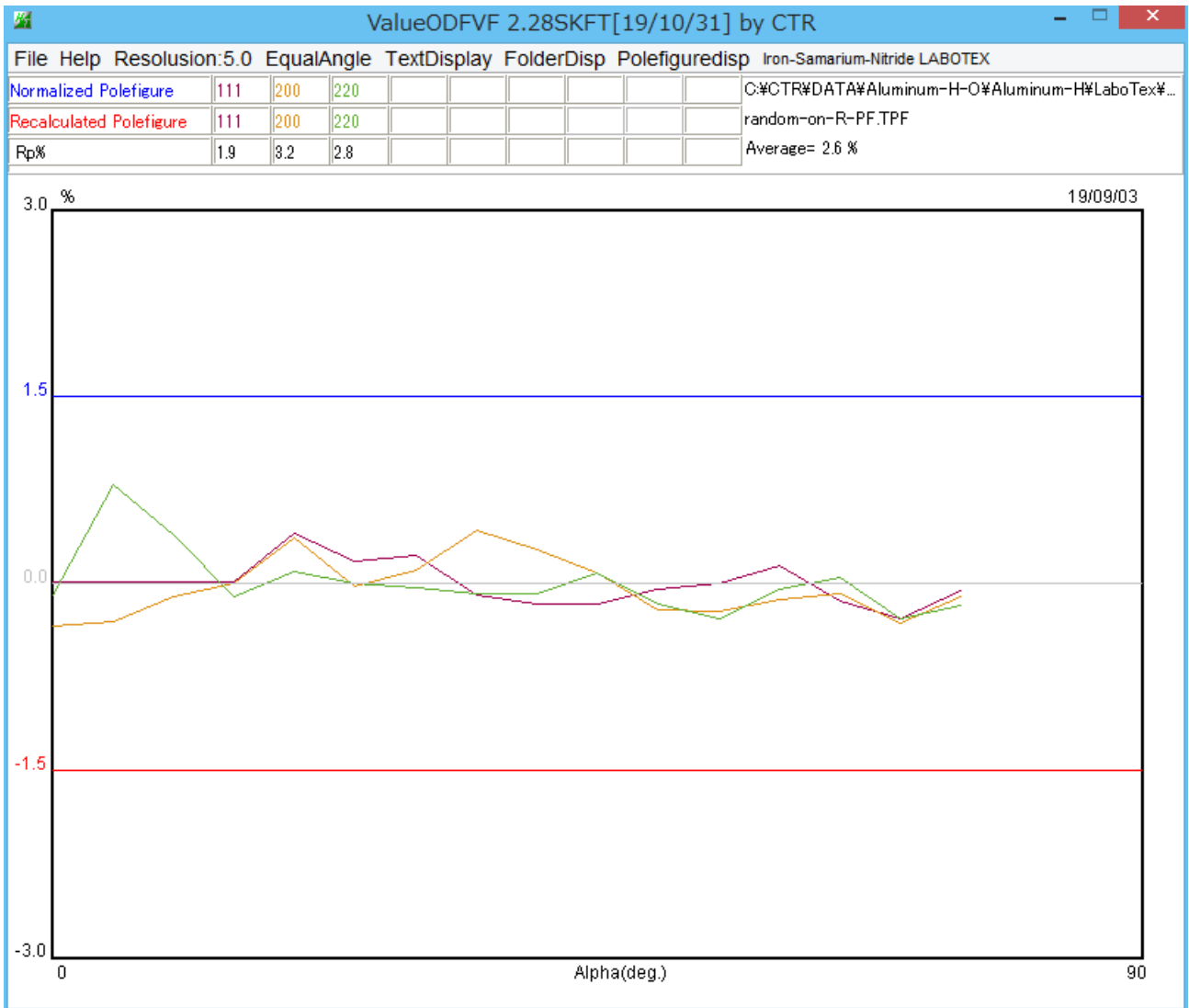


CTRによるRp% (CTRでは方位密度が小さい部分は計算から削除しています)

ValueODFVFによる再defocus補正

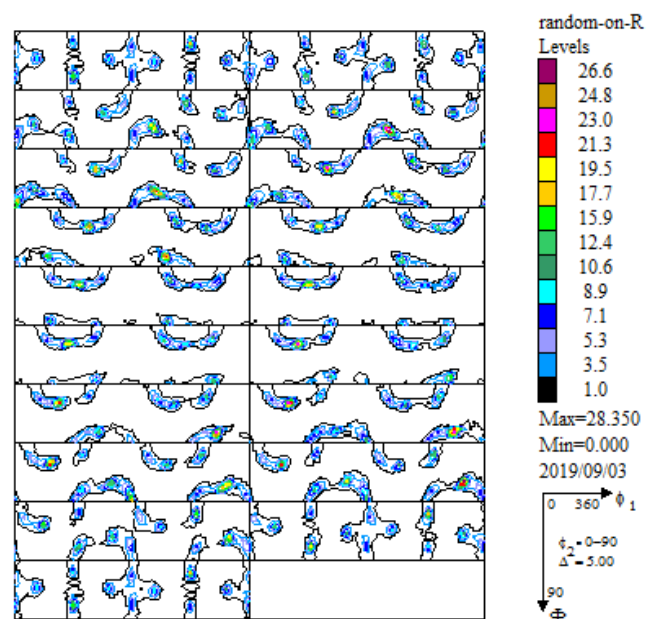
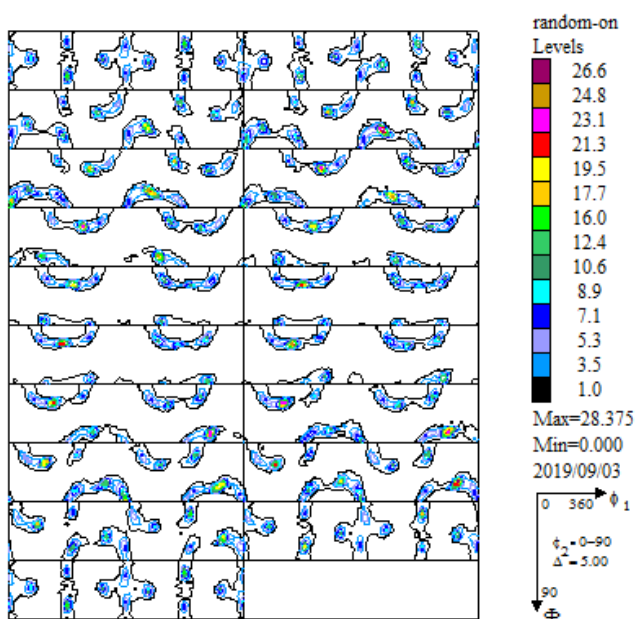


Rp % 8.87 → 7.42 dRp % 0.93 → 0.98  
 再計算 defocus 補正ではRp%が下がります。



Random 補正データの ODF 図

再defocusのODF図





# ODFPoleFigure2 ソフトウェアによる random 補正なし

## ODF Calculation (Finished)

Rp

dRp

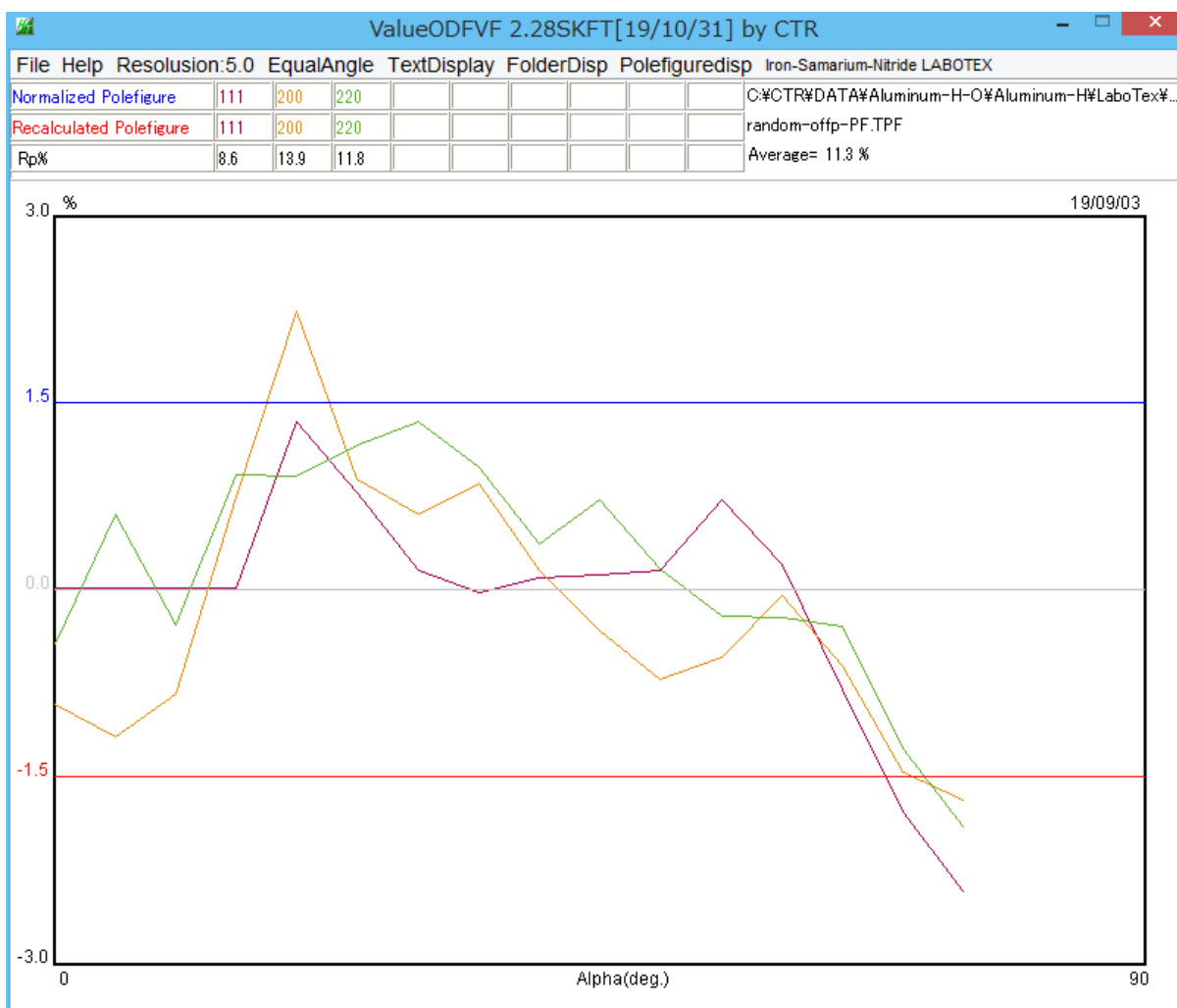
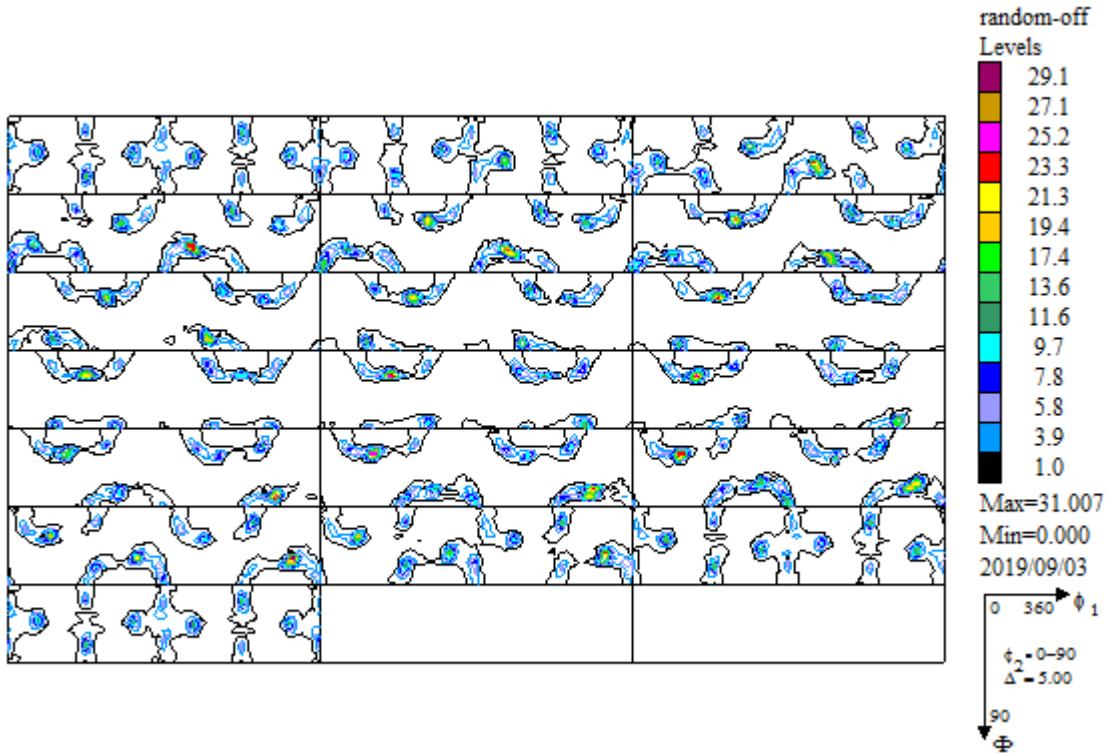
Calculation Progress:  (100.0%)

Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp%](Lim. = 1.00)	dRp%](Lim. = 1.00)
3	3	40	15.86	3.15
3	4	41	15.60	1.66
3	5	42	15.50	0.63

Creation of pole figures files NPF and RPF  
Creation of orientation distribution file ODF

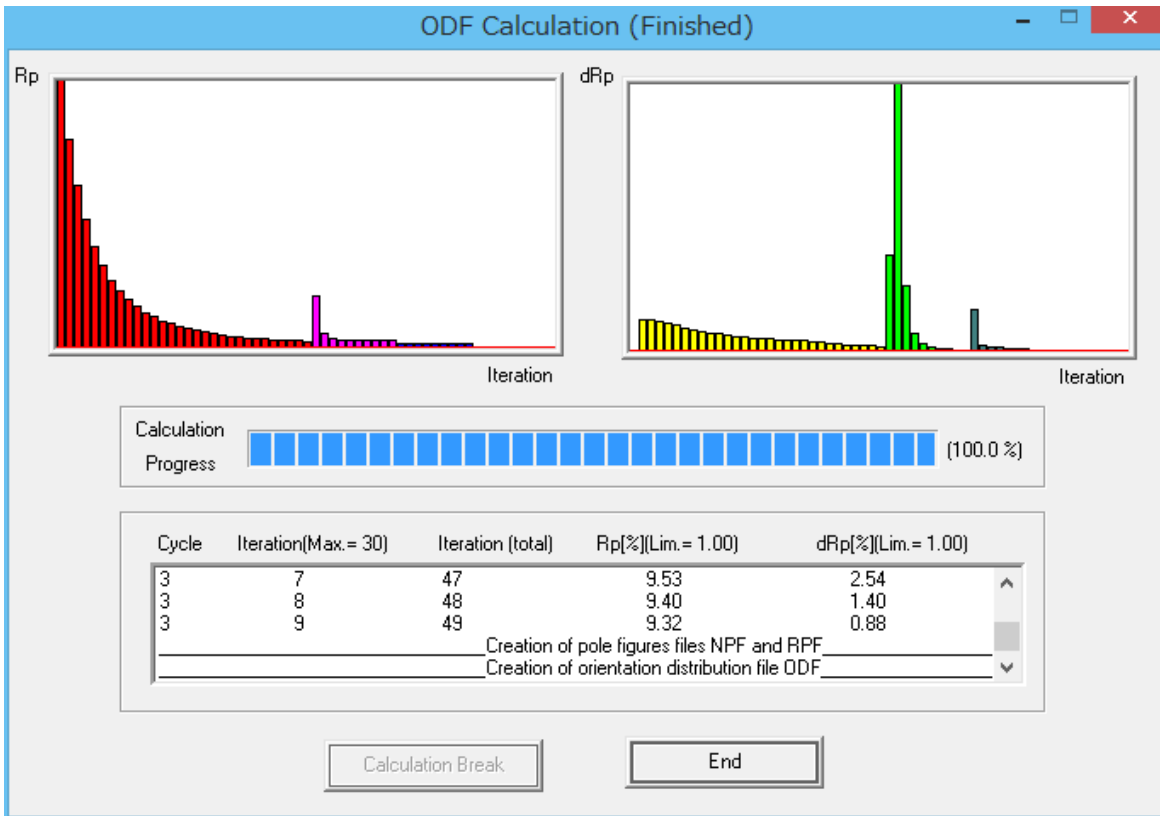
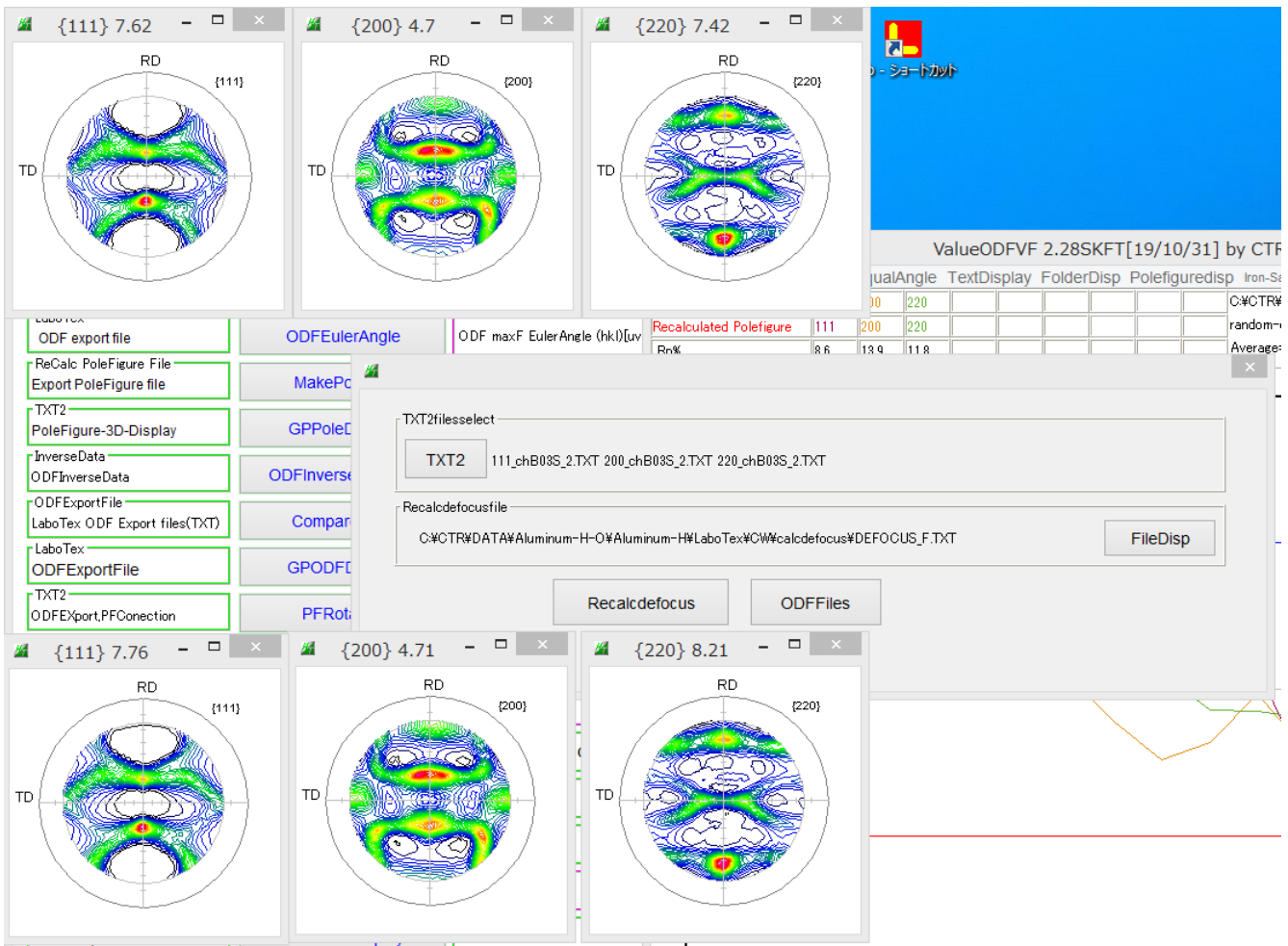
Calculation Break

End

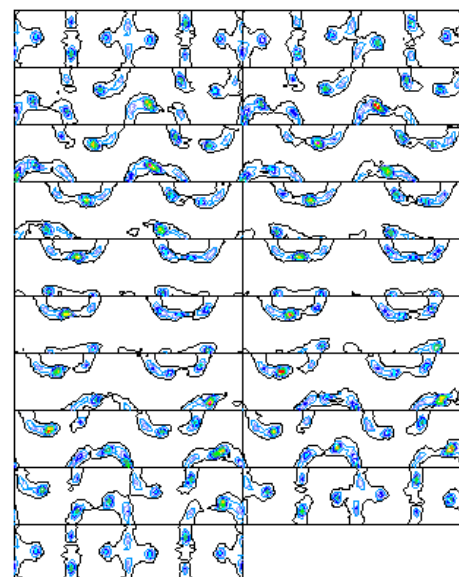
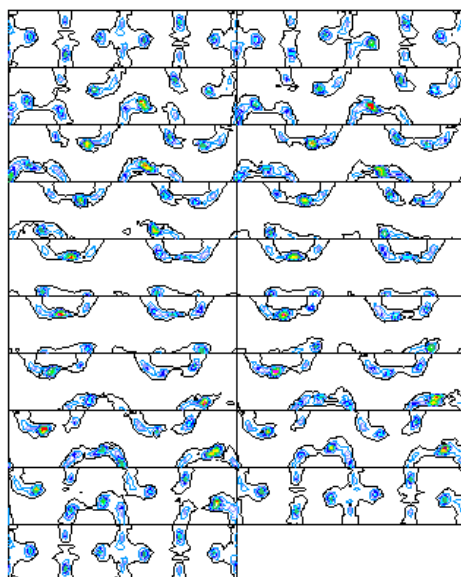
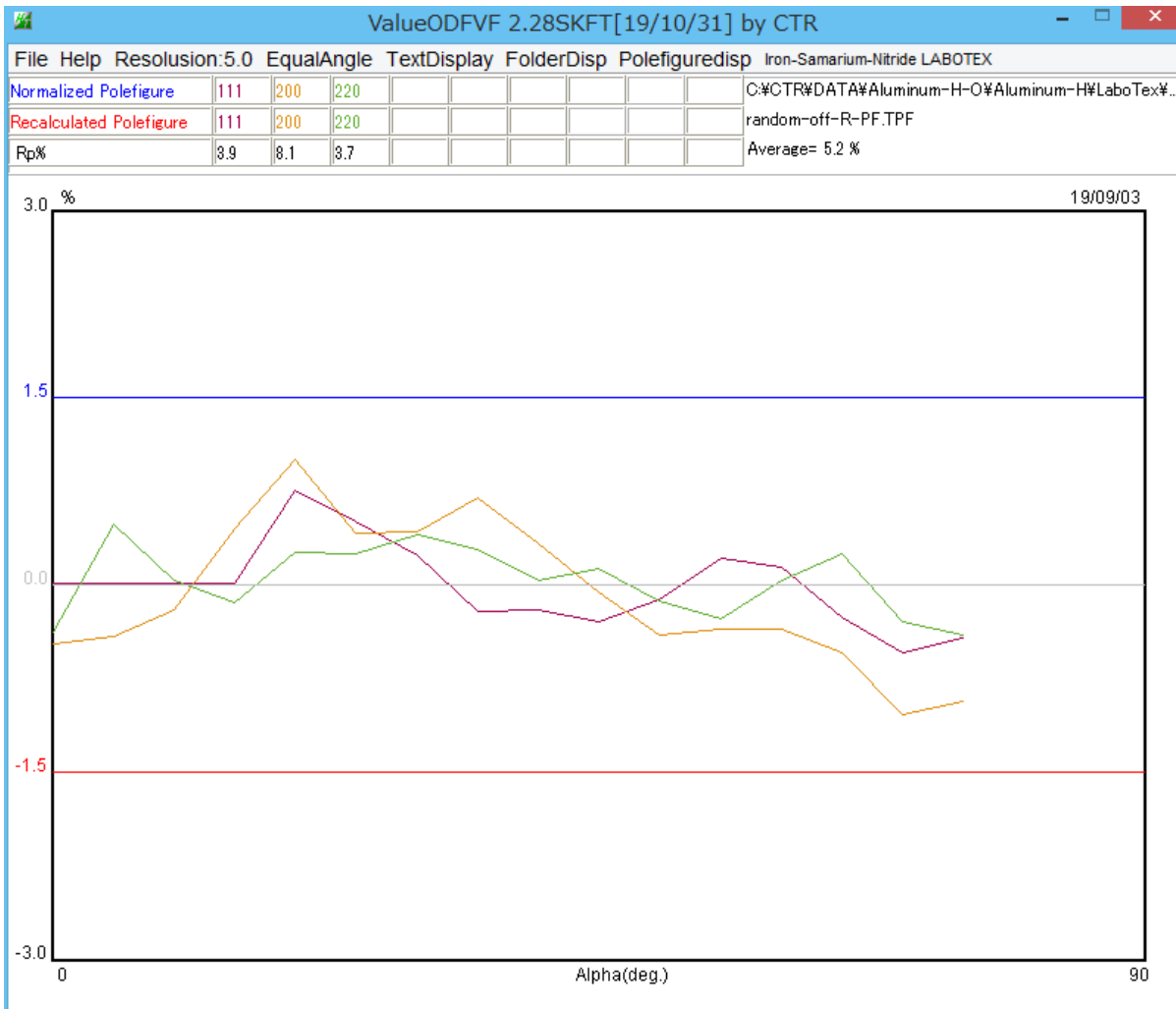


± 1.5%をはみ出しています。

ValueODFVFによる再defocus補正



Rp % 15.50 → 9.32    dRp % 0.63 → 0.88  
Rp %が改善されます。



データをまとめると

	random補正あり	ranfom補正なし
LaboTexRp%	8.87	15.5
LaboTexdRp%	0.93	0.63
CTR Rp%	<b>4.8</b>	<b>11.3</b>
ODF Max	<b>28.375</b>	<b>31.000</b>
再defocus補正LaboTexRp%	7.42	9.32
再defocus補正LaboTexdRp%	0.98	0.88
CTR Rp%	<b>2.6</b>	<b>5.2</b>
ODF Max	<b>28.350</b>	<b>28.970</b>

r a n d o m補正を行うと、正解が得られます。

r a n d o mデータが悪い場合、ValueODFVF ソフトウェアで再 defocus 補正を行うことで正解が得られる可能性があります。

r a n d o m試料がない場合、ODFPoleFigure2 ソフトウェアの計算 d e f c o u s 補正を行えば解析可能ですが、r a n d o m補正を行わないで、ValueODFVF ソフトウェアによる再 d e f o c u s 補正を行うことで、本データでは正解が得られています。