

極点図1面  $\{002\}$  によるTi-ODF解析のErrorに関して

020年07月10日

*HelperTex Office*

## 概要

ユーザより、Hexagonalの底面極点図1面によるODF解析の依頼がありました。

ODF解析は複数の極点図からそれぞれの矛盾を取り除いて解析が行われ、ODF図と再計算極点図が計算され、矛盾をRp%として表示している。

一部のODFソフトウェアでは、1面によるODF解析が行われ、Rp%が異常に低い値で計算される。この現象を考察する。

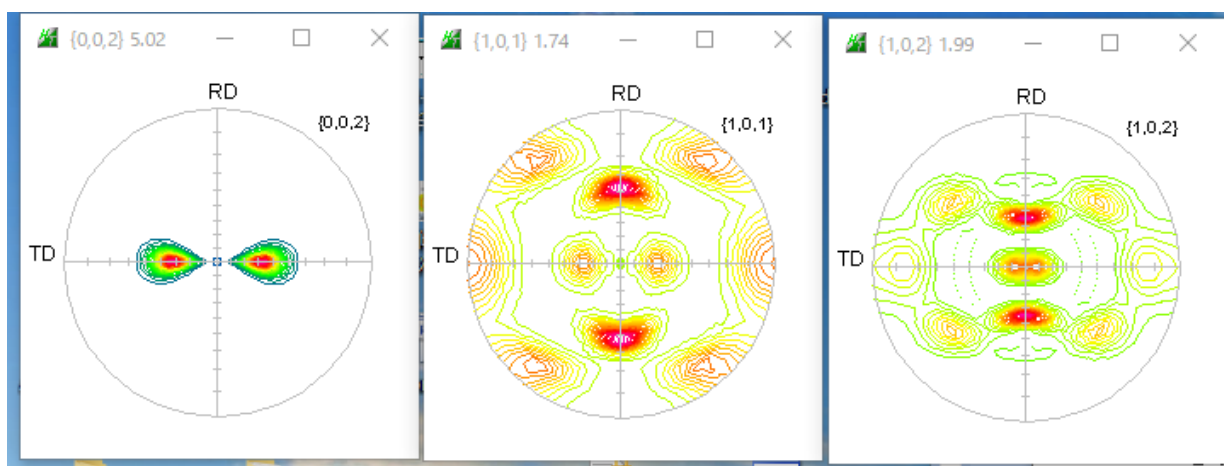
方法は、TD-spilt  $\{0\ 1\ -1\ 3\} <2\ -1\ -1\ 0>$ をVF10%-半価幅20degのODFから再計算極点図を作成し、defocus補正ありなしで比較

バックグラウンド（無配向）を90%とすることでdefocusの影響をおおきくしています。

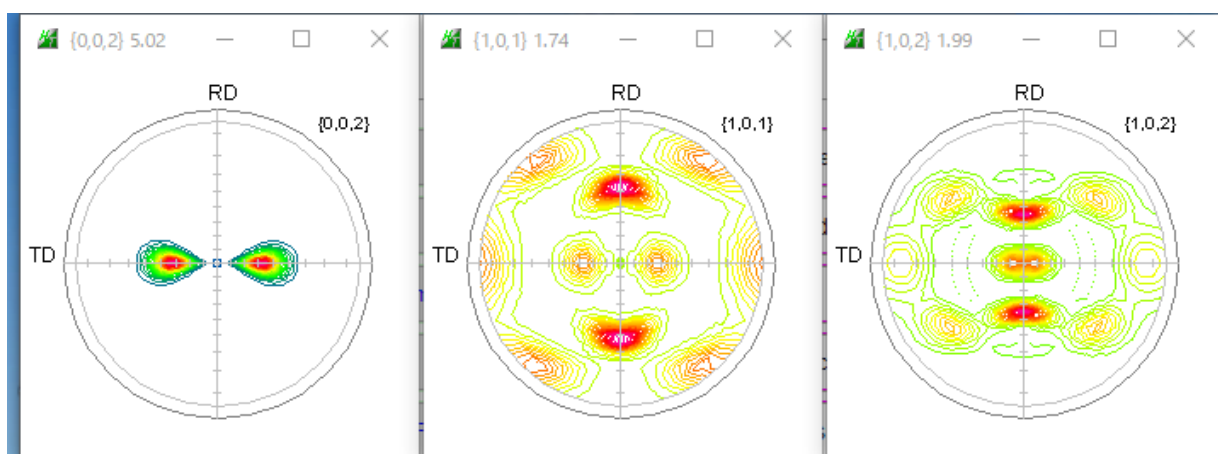
極点図は、 $\{0\ 0\ 2\}$ 、 $\{1\ 0\ 1\}$ 、 $\{1\ 0\ 2\}$ でODF解析しError評価

更に $\{0\ 0\ 2\}$ 極点図1面によるODF解析のError評価

再計算極点図 (Ti)

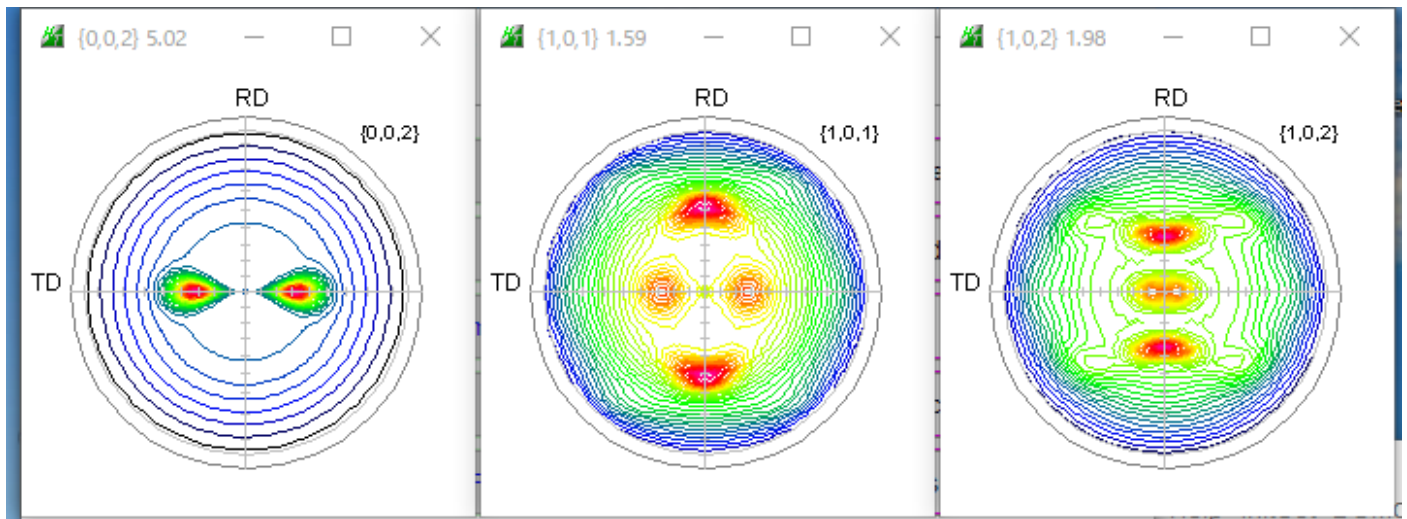


の完全極点図を反射極点図に変更する（外周部分を削除）。

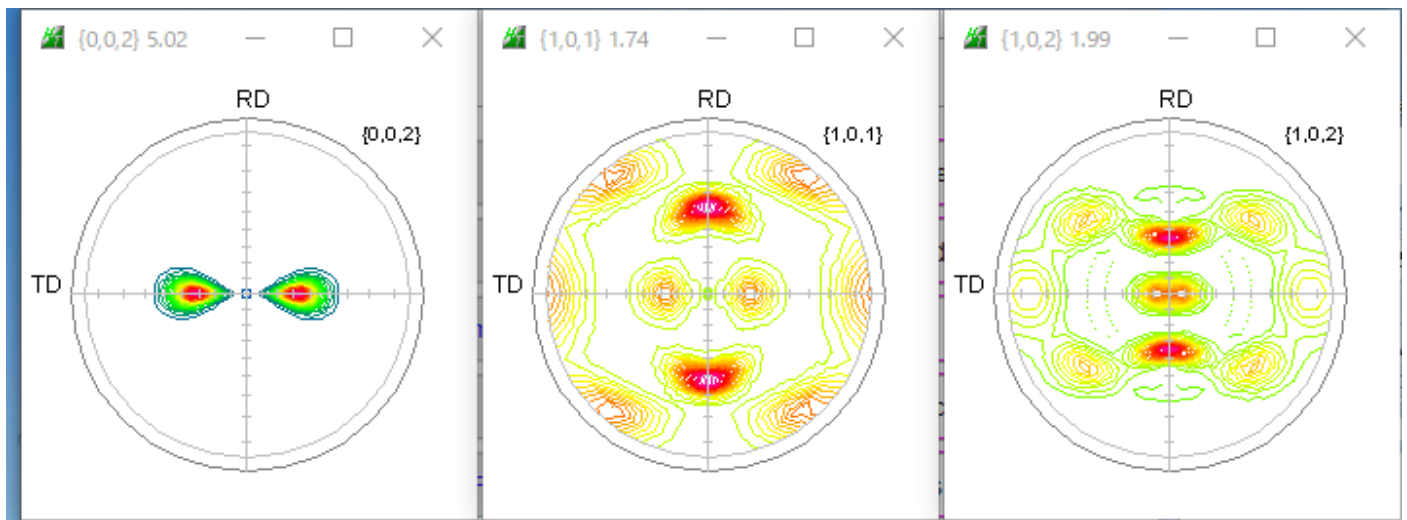


MTEXによりODF解析を行い、再計算極点図をExportし、Rp%を計算する

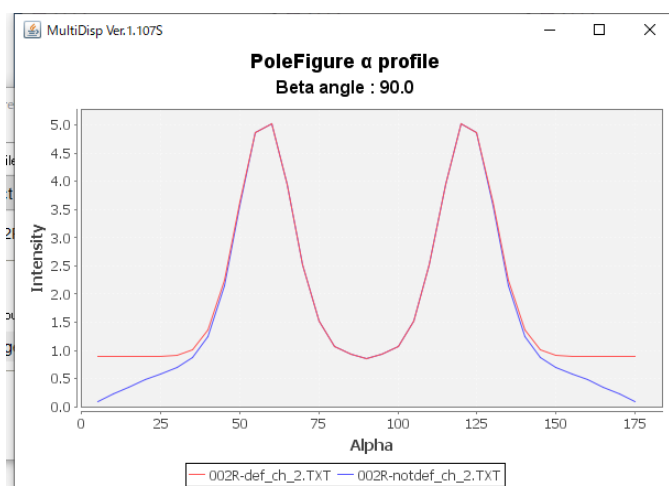
defocus 補正なし極点図 (極点図の外周に向け密度が徐々に低下)



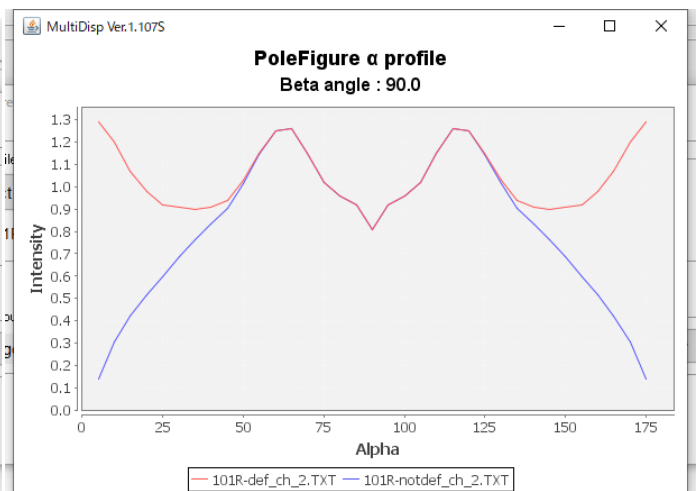
defocus 補正あり極点図



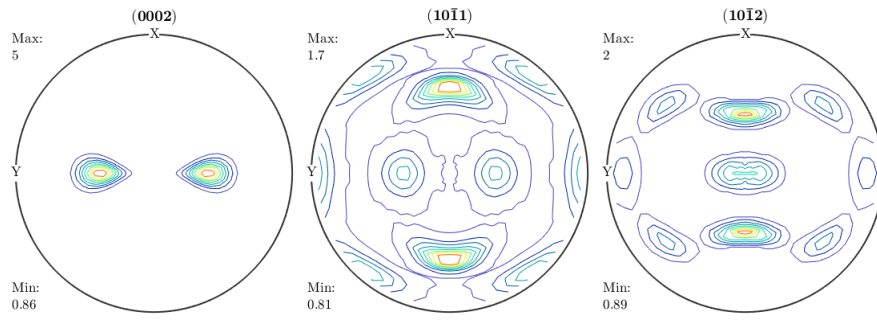
{002} defocusあり (赤) なし (青) 比較



{101} defocusありなし比較

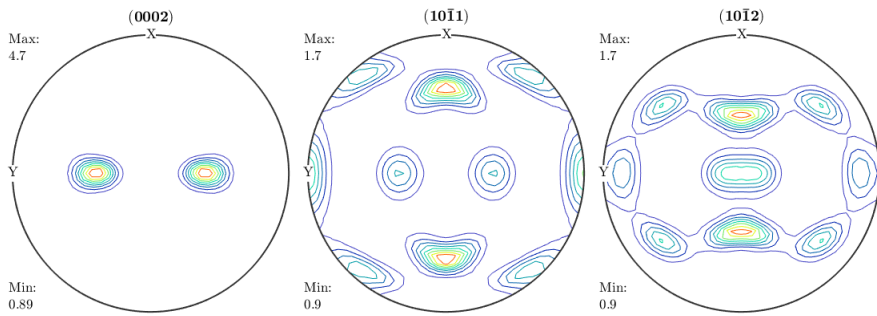


MTEXによる3面極点図defocusあり計算

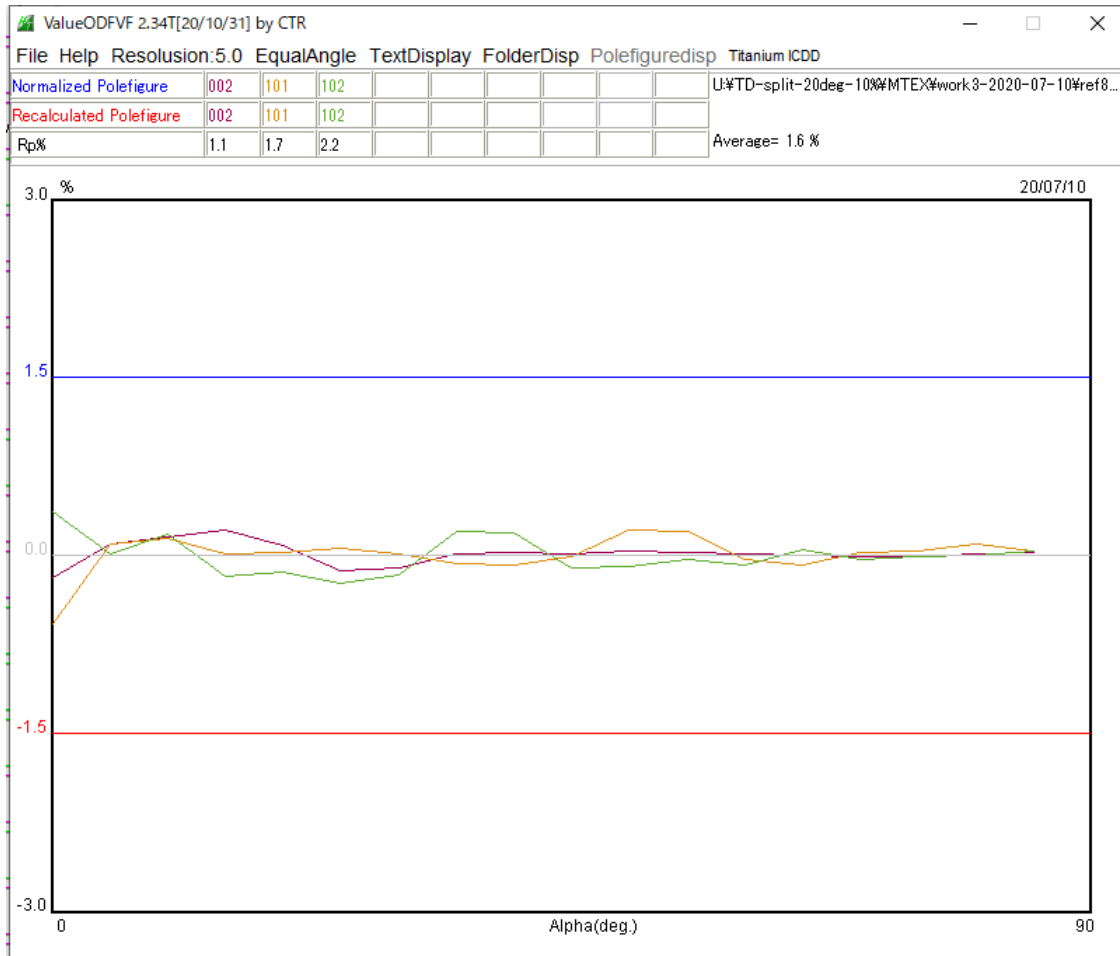


ODF解析結果のError

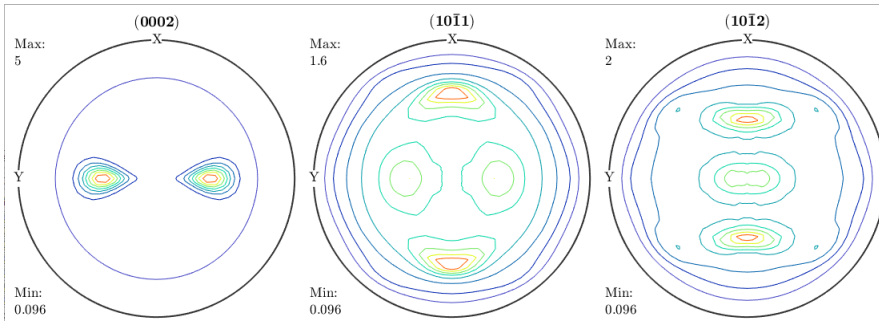
Finished PDF-ODF inversion.  
 error: 1.4981E-002  
 alpha: 1.0033E+000 1.0098E+000 9.9987E-001



Rp%計算

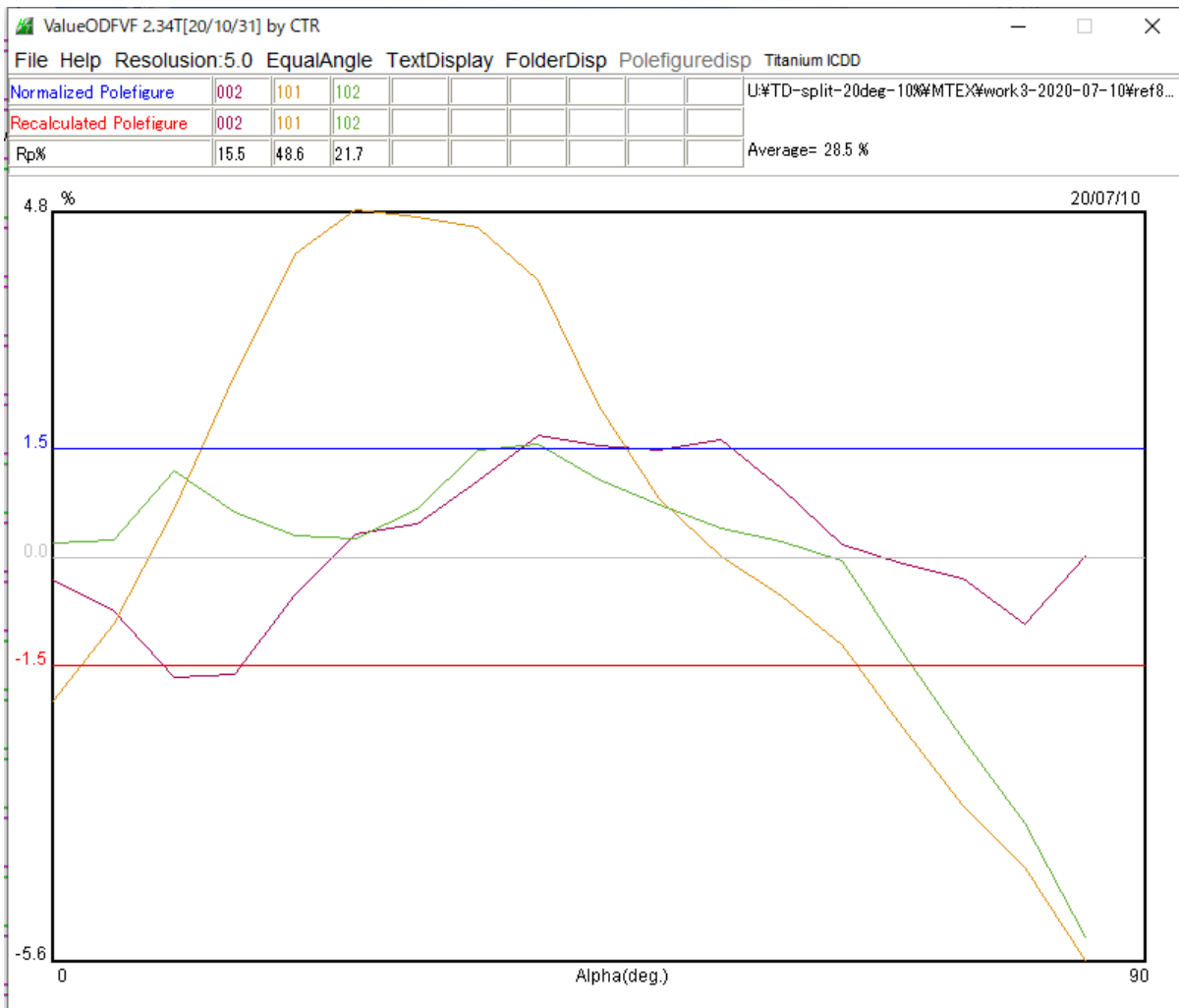
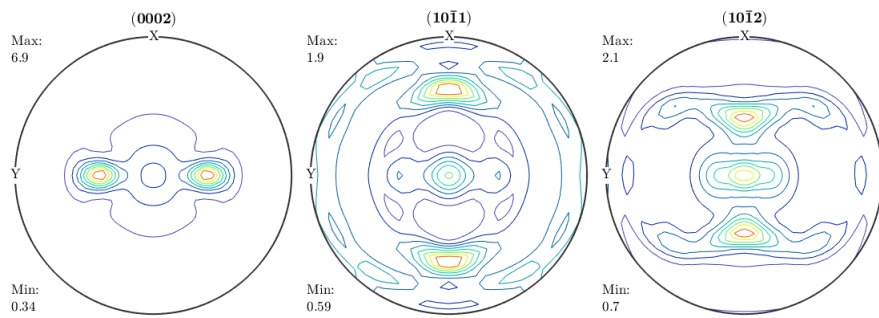


MTEXによる3面極点図defocusなし計算

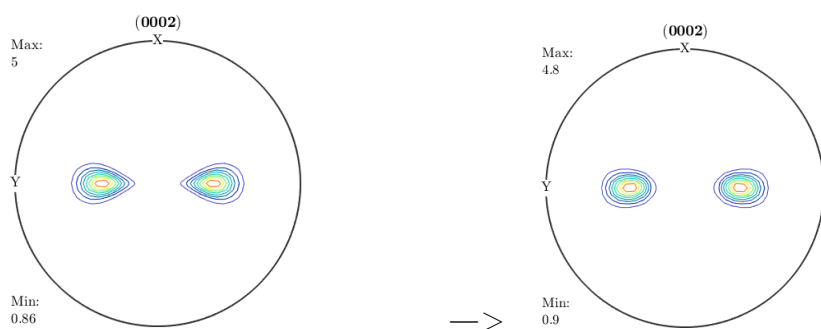


ODF解析結果のError

Finished PDF-ODF inversion.  
 error: 2.8397E-001  
 alpha: 6.8150E-001 7.7775E-001 7.5030E-001



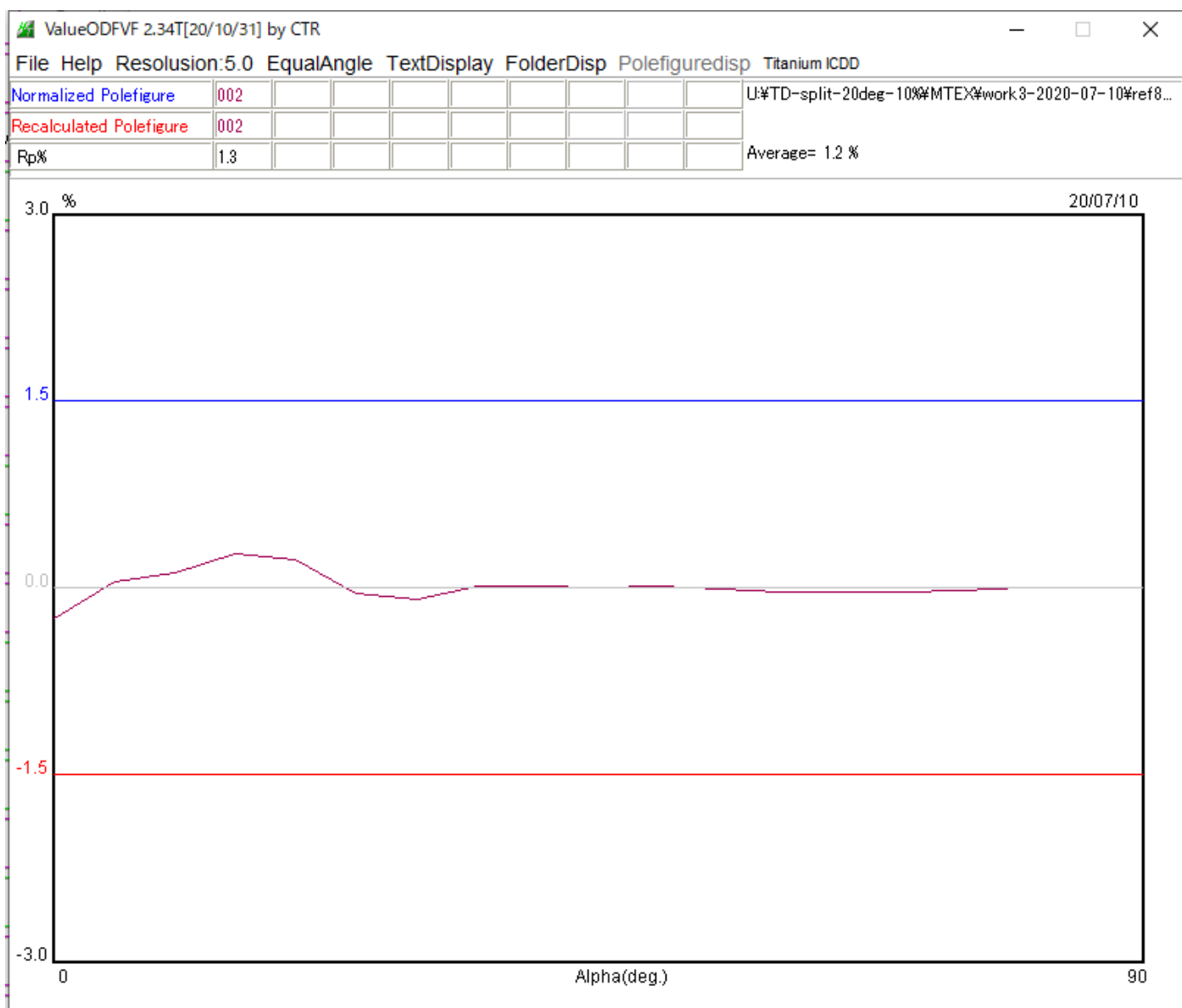
MTEXによる1面極点図defocusあり計算



Finished PDF-ODF inversion.

error: 1.0447E-002

alpha: 1.0073E+000





## まとめ

解析結果のRp%をまとめると以下になる。

入力極点関数	defocus	{002}Rp%	{002}最大極密度	{002}最小極密度
3	ON	1.1	4.7	0.89
3	OFF	15.5	6.9	0.34
1	ON	1.3	4.8	0.9
1	OFF	1.3	6.9	0.15

defocus 処理を行わないと、入力極点図には、大きなErrorが含まれています。

入力極点関数を増やすことで個々のErrorを検出し、補正されます。

しかし、入力極点図が1面の場合、相互のError処理が出来ないため、入力極点図が再現される再計算極点図のようなODF結果が計算されています。

1面では、Errorが含まれていても検出出来ません。

より良い解析結果を得る為には、3面以上を入力することが望ましい。

Rp%は入力極点図と再計算極点図から計算されています。

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