

S m a r t L a b - O D F の R p % を 計 算 す る

2022年04月06日

HelperTex Office

概要

R p %はODF解析前後の極点図の一致度を示す値であり、入力極点図の精度も表しています。本資料では、CTRソフトウェアで計算を行った極点図をSmartLab-ODFで解析を行い一致度を計算してみます。

R p %の計算

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

where :

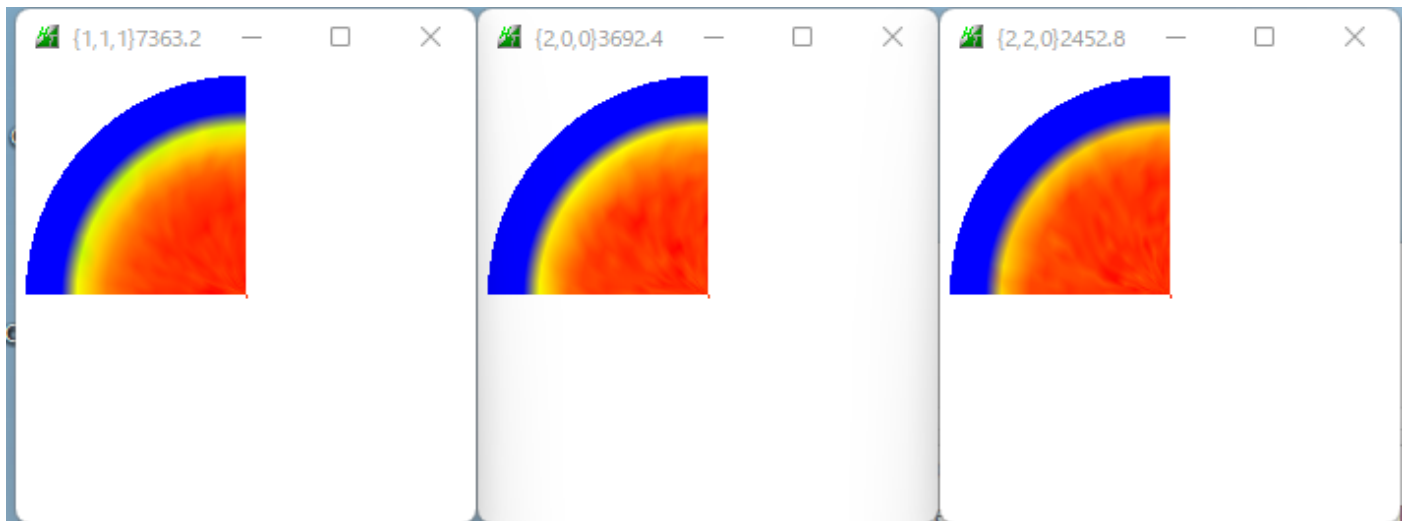
$RP_{\{hkl\}}$ - relative error for $\{hkl\}$ pole figure,

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

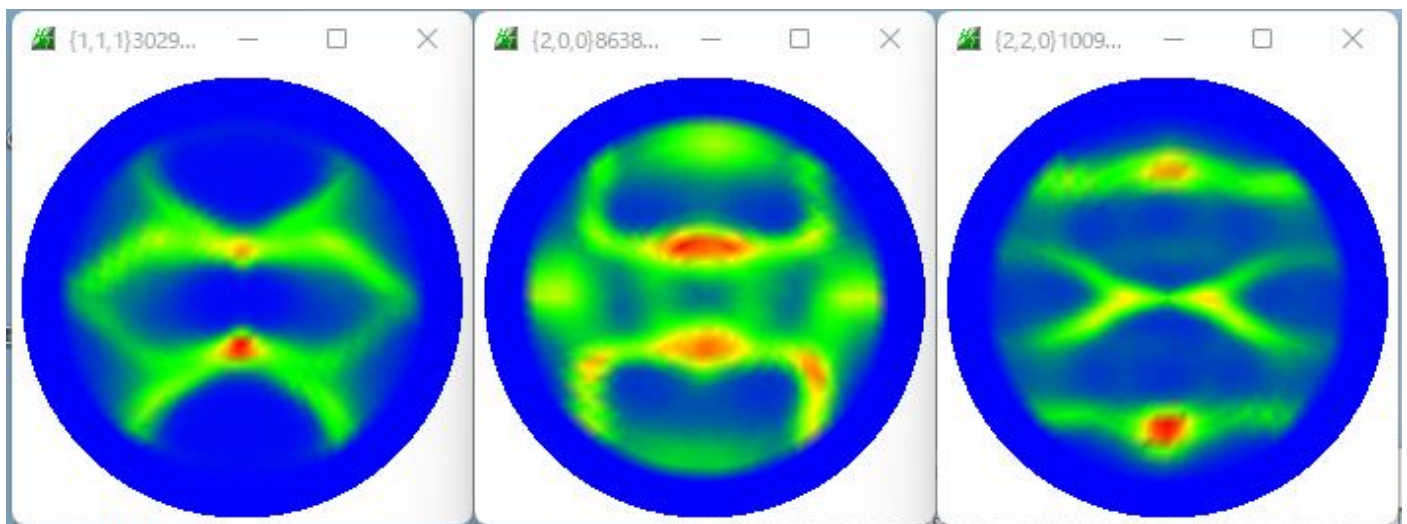
$\{PF_{calc.}\}_i$ - intensity of calculated pole figure in point i,

N - number of measured points on pole figure.

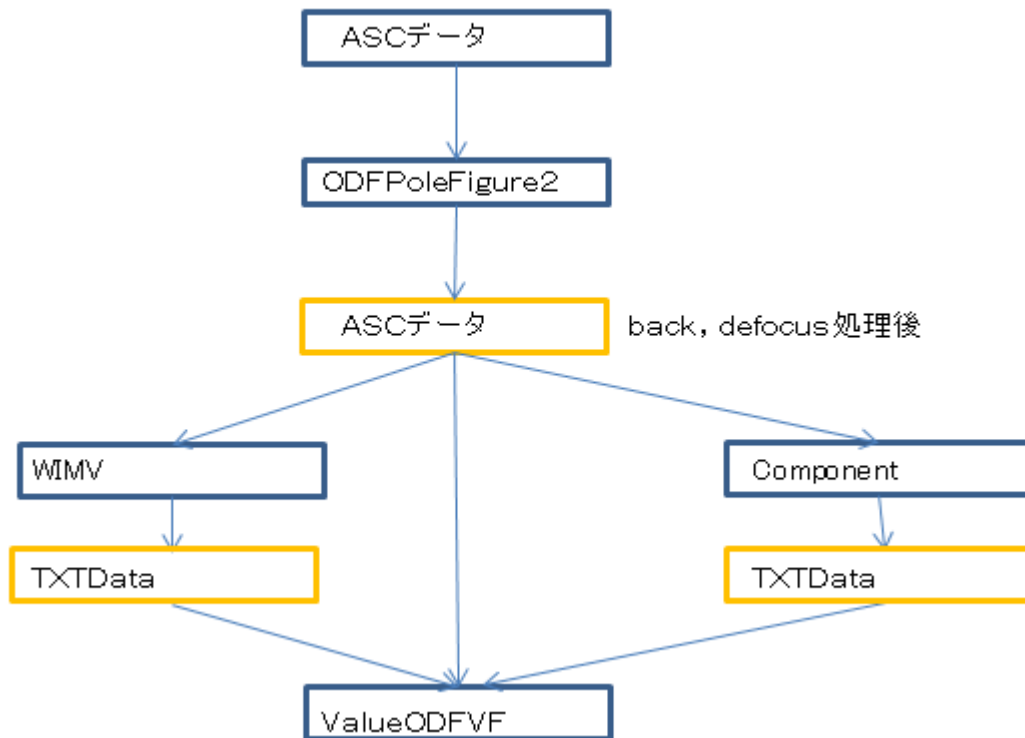
randomデータ



配向データ



処理



測定データ（ASCデータ）を

ODFPoleFigure2でバックグラウンド処理、defocus処理を行い、ASCファイル作成

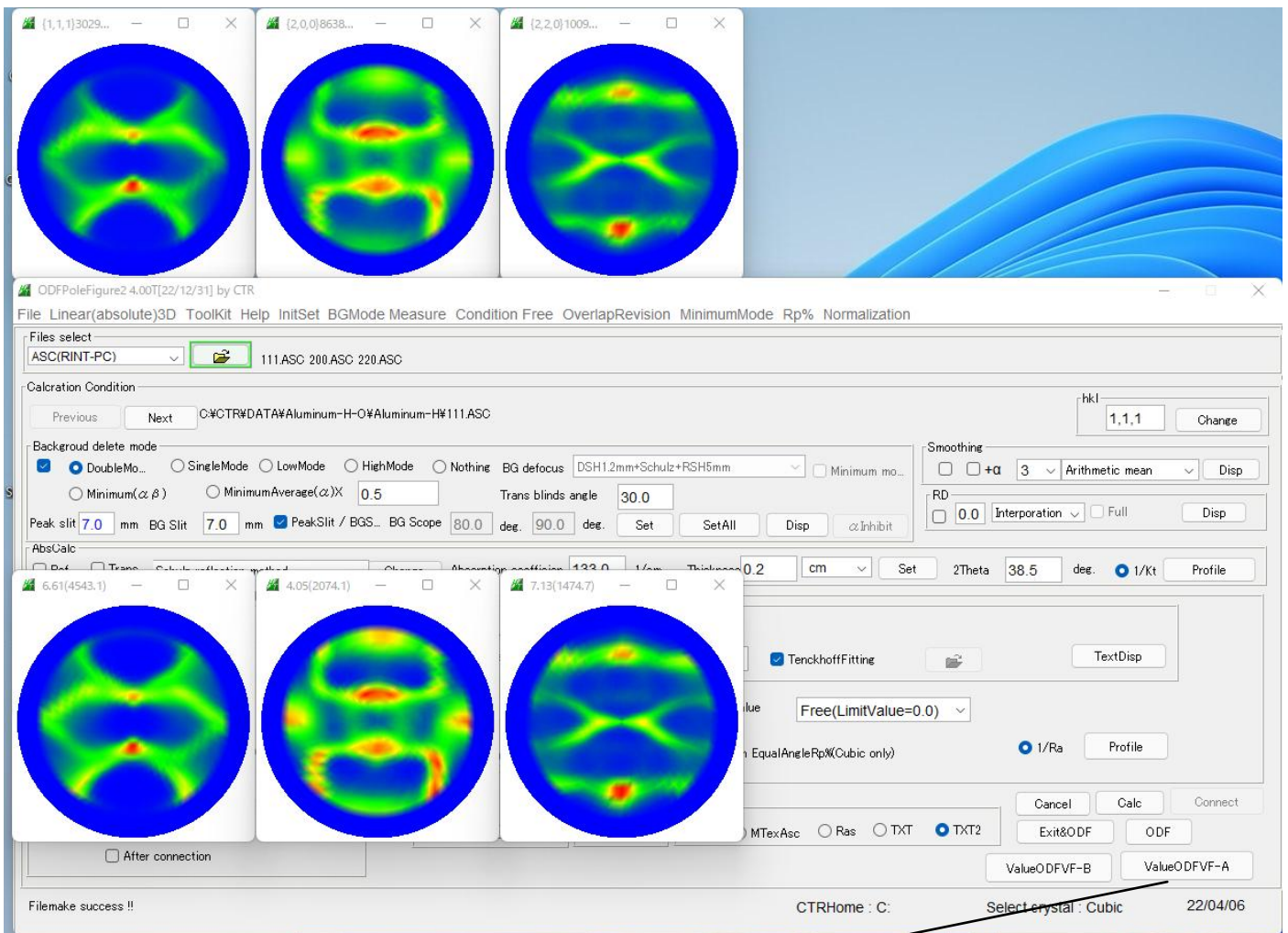
極点処理後のASCデータをSmartLab-ODFで解析

WIMVの再計算極点図をExport (TXTData)

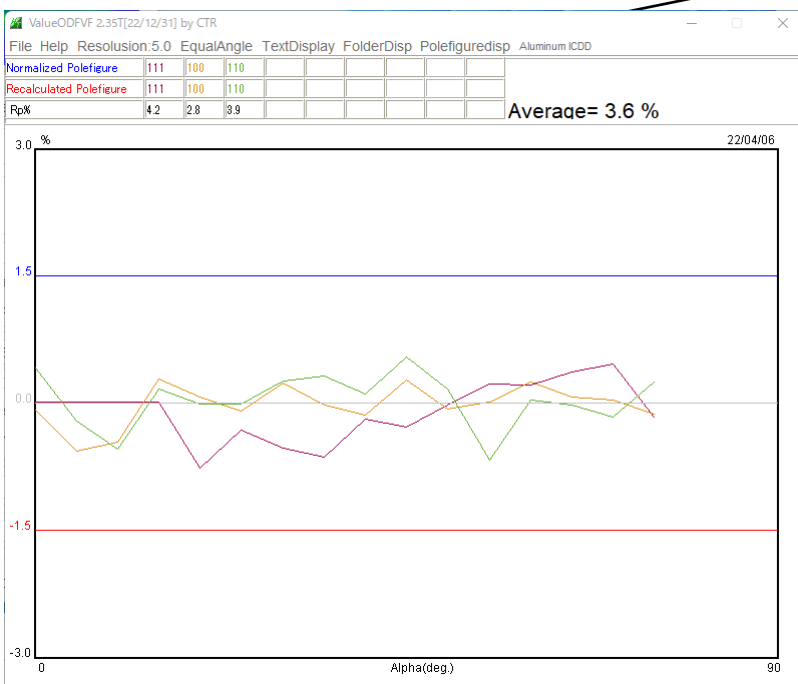
Componentの再計算極点図をExport (TXTData)

ASCデータとTXTDataからValueODFVFでRp%計算

ODFPoleFigure2ソフトウェア処理



Rp%計算



Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	4.2	2.8	3.9

ほぼ正確な測定データが得られています。

処理結果をASCファイル (MTEX用ASCにExport)

The screenshot shows the PFToODF3 software interface. The title bar reads "PFToODF3 8.54T[22/12/31] by CTR". The menu bar includes "File", "Option", "Symmetric", "Software", "Data", and "Help".

On the left, a list of export options is shown, with "*MTEX(ASC) CCW" selected. Other options include "Outside text(Vector) CCW", "Outside CSV(Vector) CCW", "Inside text CCW", "LaboTex(EPF)CCW", "Labotex(EPF) CW", "Stadard ODF CCW", "Siemens CCW", "TexTools(txt) CCW", "*TexTools(pol) CCW", "TexTools(pol) CW", "*TexTools(pol)CCW-zero-cut", "TexTools(pol)CW-zero-cut", "*popLA(RAW)CCW", "popLA(RAW)CW", "StandaradODF2.5 CCW", "Bunge(PF) CCW", "MulTex(TD:beta=0)CCWXT2", "MTEX(ASC) CW", "LaboTex(PPF) CW", "*LaboTex(PPF) ATEX CCW", "TXT2", and "RAS".

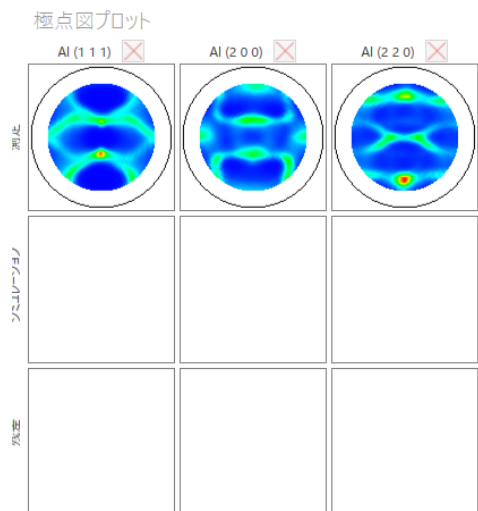
The main area contains a table with the following columns: "ab,intens.))", "h,k,l", "2Theta", "Alpha scope", "AlphaS", "AlphaE", and "Select". The table lists several diffraction peaks:

ab,intens.))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
	1,1,1	38.5	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,0,0	44.73	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,2,0	65.1	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

At the bottom, there are buttons for "Data storage", "Epf file save", and a text field for "Labotex(EPF),popLA(RAW) filename" containing the text "labotex".

SmartLab-WIMV

規格化のみ処理



極点図補正

適用 復元 適用/復元: <すべてのデータ> 測定極点図

- バックグラウンド補正
- 吸収
- デフォーカス
- 面法線の調整
- リグリッド
- 平滑化
- 1/4対称化
- 規格化
- 同じ反射の極点図と接続

ODFを計算 ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: WIMVモデル ODFグリッド

試料の対称性: 1/4対称

φ₁ステップ(°): 5.00

α解析開始角度(°): 0.00 φステップ(°): 5.00

α解析終了角度(°): 90.00 φ₂ステップ(°): 5.00

パラメーター

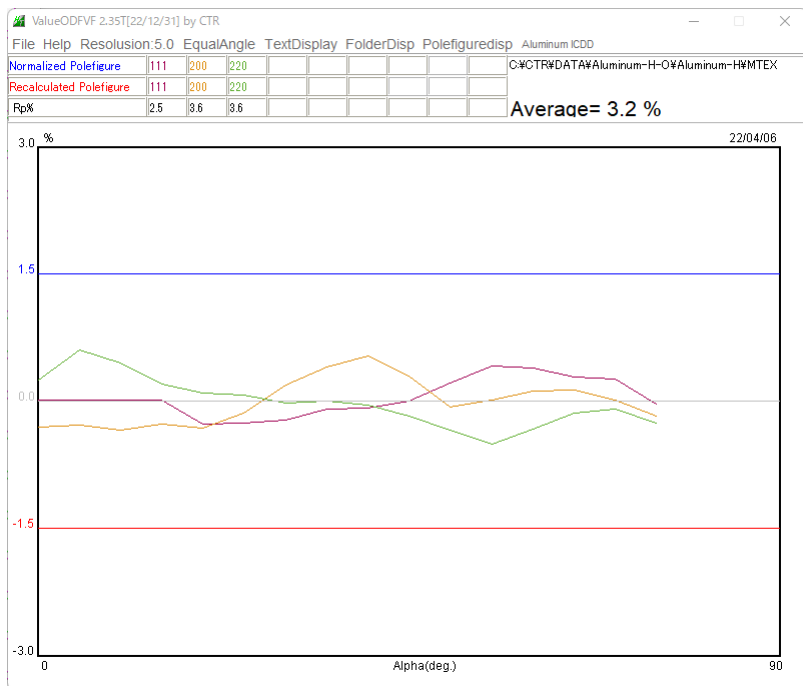
結晶相: Al

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=17.46 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算



測定時の値とほぼ同等

ODF計算

計算方式:

試料の対称性:

α解析開始角度(°):

α解析終了角度(°):

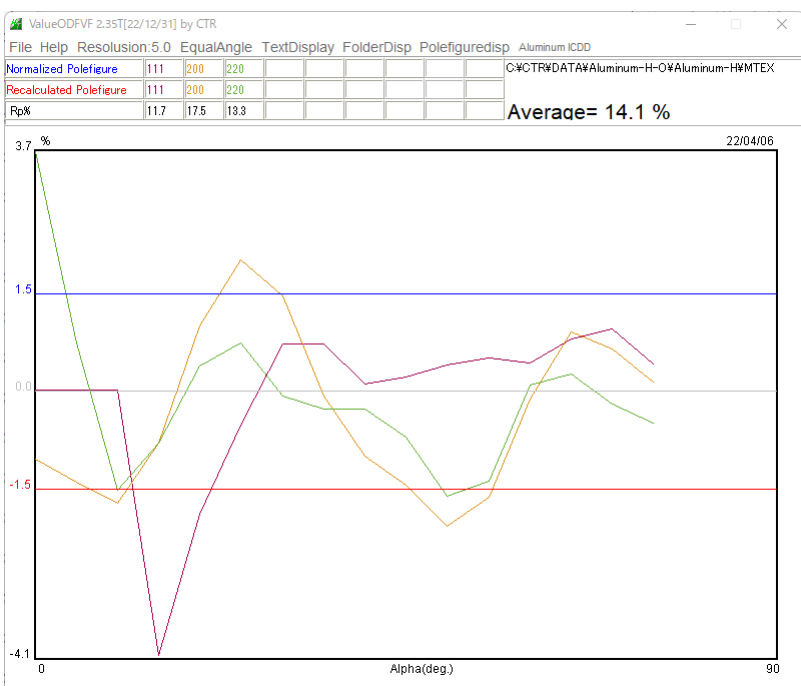
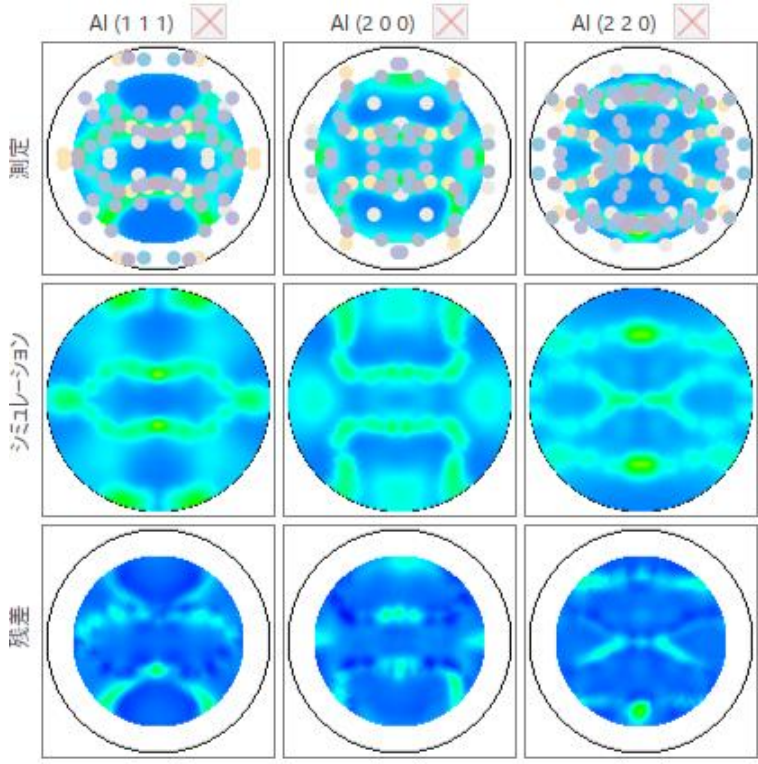
ODFグリッド

φ₁ステップ(°):

φステップ(°):

φ₂ステップ(°):

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	.	Ta...	■	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 9	22.58
2	.	S	■	<input checked="" type="checkbox"/>	(2 9	27.27
3	.	Br...	■	<input checked="" type="checkbox"/>	(2 9	8.49
4	.	Co...	■	<input checked="" type="checkbox"/>	(4 3	15.18
5	.	Cu...	■	<input checked="" type="checkbox"/>	(6 1	19.08
6	.	G...	■	<input checked="" type="checkbox"/>	(3 11	7.09

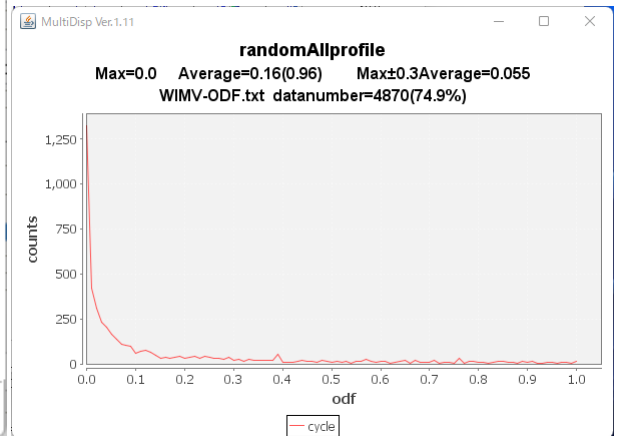
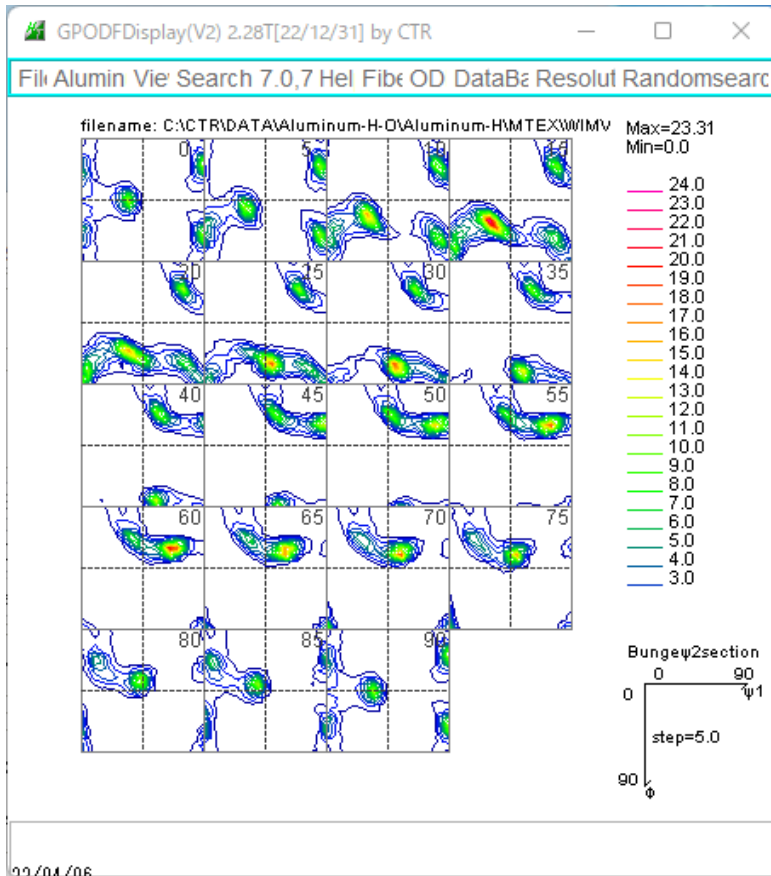


Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	11.7	17.5	13.3

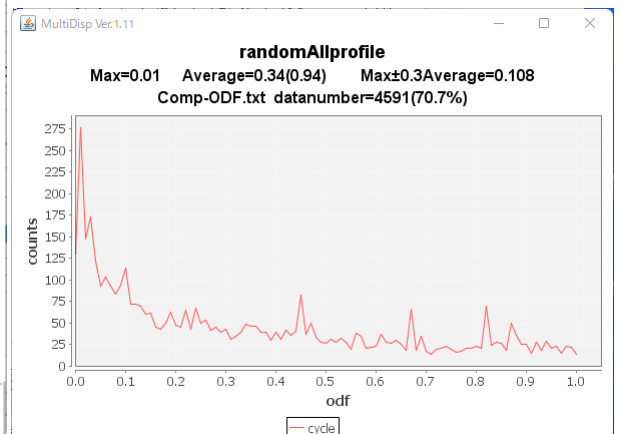
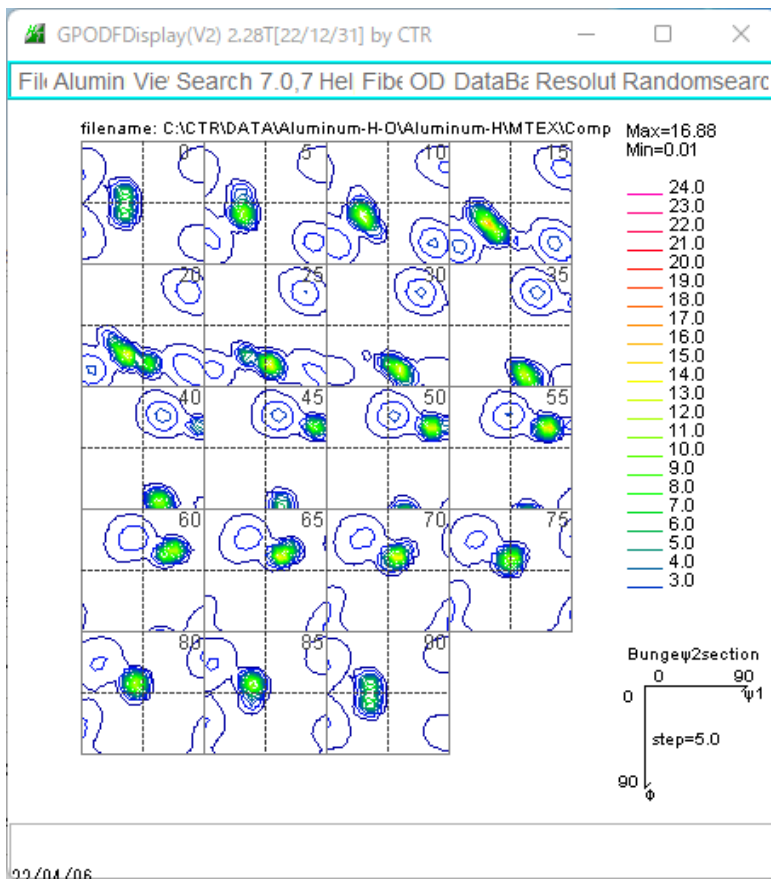
± 1.5%からのはみ出しが認められる。

ODF 比較

WIMV

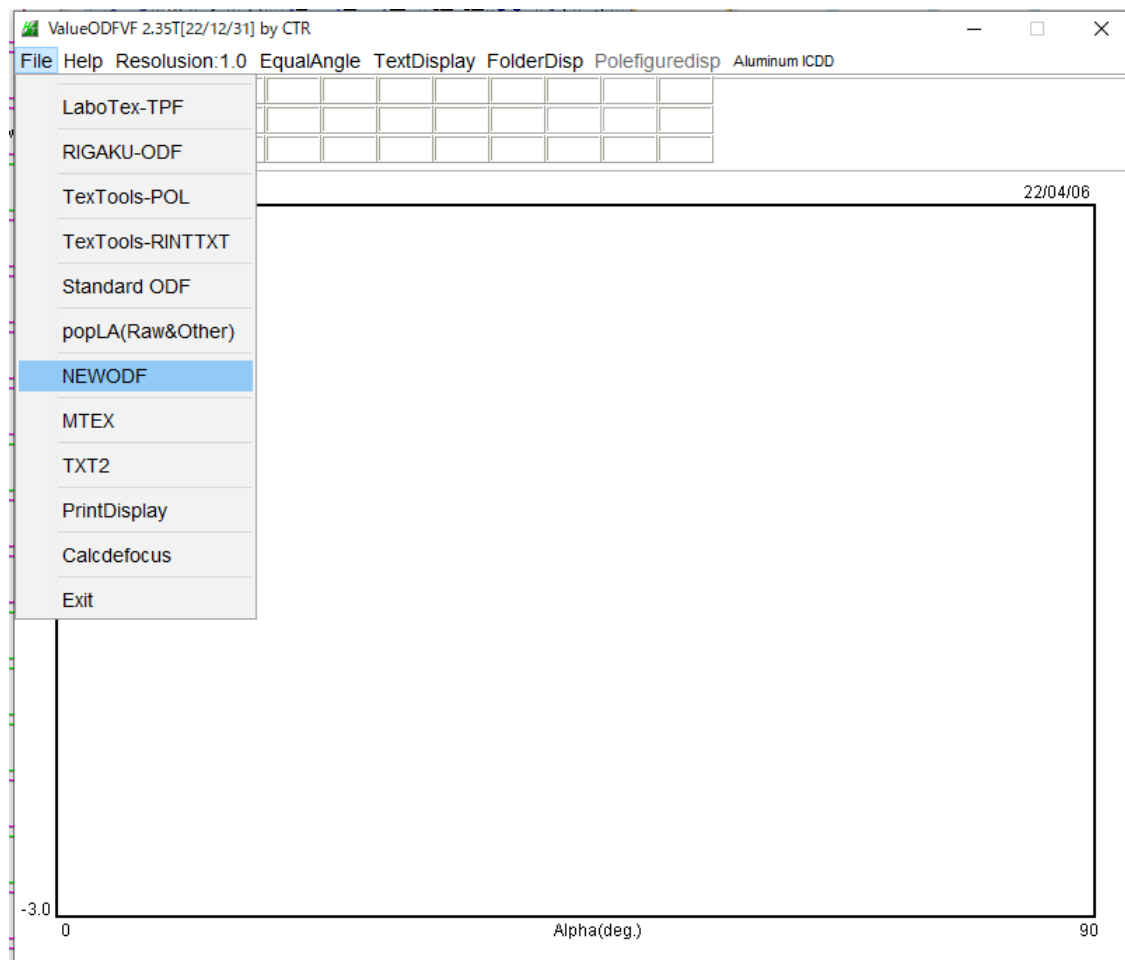


Component

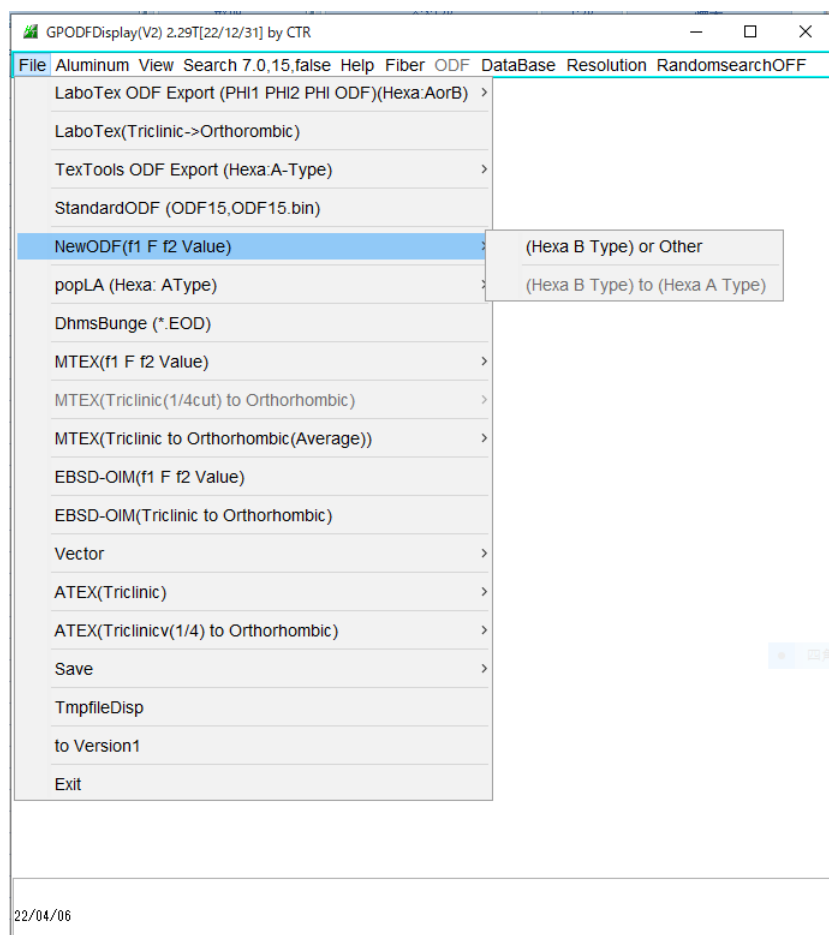


randomは0%が計算されている。

SmartLab-ODFのRp%確認



SmartLab-ODFのExportODF表示



SmartLab-ODFのExportした極点図

CTRソフトウェアによる極点図は、極点図の中心が90度のTXT2データですが、ODFで計算した極点図は、極点図の中心が0度のTXT2である。この極点図中心が0度のTXT2を極点図中心が90度に変換する。ODF解析によるそれぞれのフォーマットから変換します。SmartLab-ODFでは、以下を選択します。

