

C u b i c 非対称 O D F 解析で (3 6 0 , 1 8 0 , 9 0) データ計算

2022年04月05日

HelperTex Office

状況

CubicのODF解析で(360, 180, 90)データが欲しいと問い合わせがありました。通常、Cubicの非対称ODF解析では(360, 90, 90)が計算される。

(360, 90, 180)はTetragonalで計算されている。

以下に、LaboTexを用い、Cubicの非対称とTetragonalの非対称を比較Tetragonal計算時の格子定数は(1, 1, 1, 90, 90, 90)を指定

StandardODF、リガクODFでは、対称解析で行われています。

1.6. Basic ranges of ODF. LaboTex structure code.

LaboTex shows ODF in a reduced basic range. The Euler angle space can be reduced due to the crystal and sample symmetries. The boundaries of the basic range of ODF in the Euler space and symmetry structure code used in LaboTex are collected in table below:

Symmetry		Cubic**		Hexagonal		Tetragonal		Trigonal		Ortho-rhombic	Mono-clinic	Triclinic
		O	T	D ₆	C ₆	D ₄	C ₄	D ₃	C ₃	D ₂	C ₂	C ₁
LaboTex structure code		7	6	11	10	5	4	9	8	3	2	1
φ ₁	triclinic* (C ₁)	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°
	monoclinic* (C ₂)	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°
	orthorhombic*(D ₂)	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°	90°
	axial*	-***	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Φ	90°	90°	90°	180°	90°	180°	90°	180°	90°	180°	180°	
φ ₂	90°	180°	60°	60°	90°	90°	120°	120°	180°	180°	360°	

図は、LaboTexの結晶系別によるeuler角度範囲です。

StandardODFは、Cubicのorthorhombic(1/4対称)で解析されています。

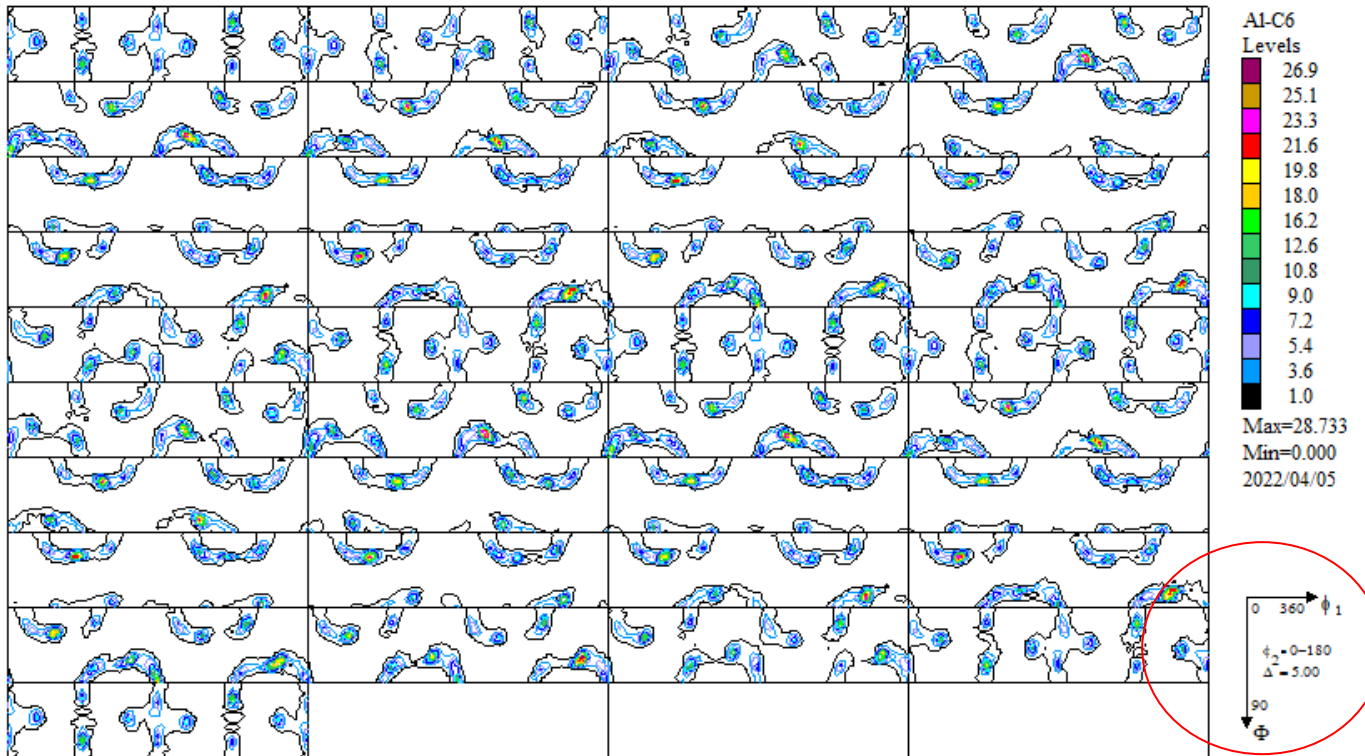
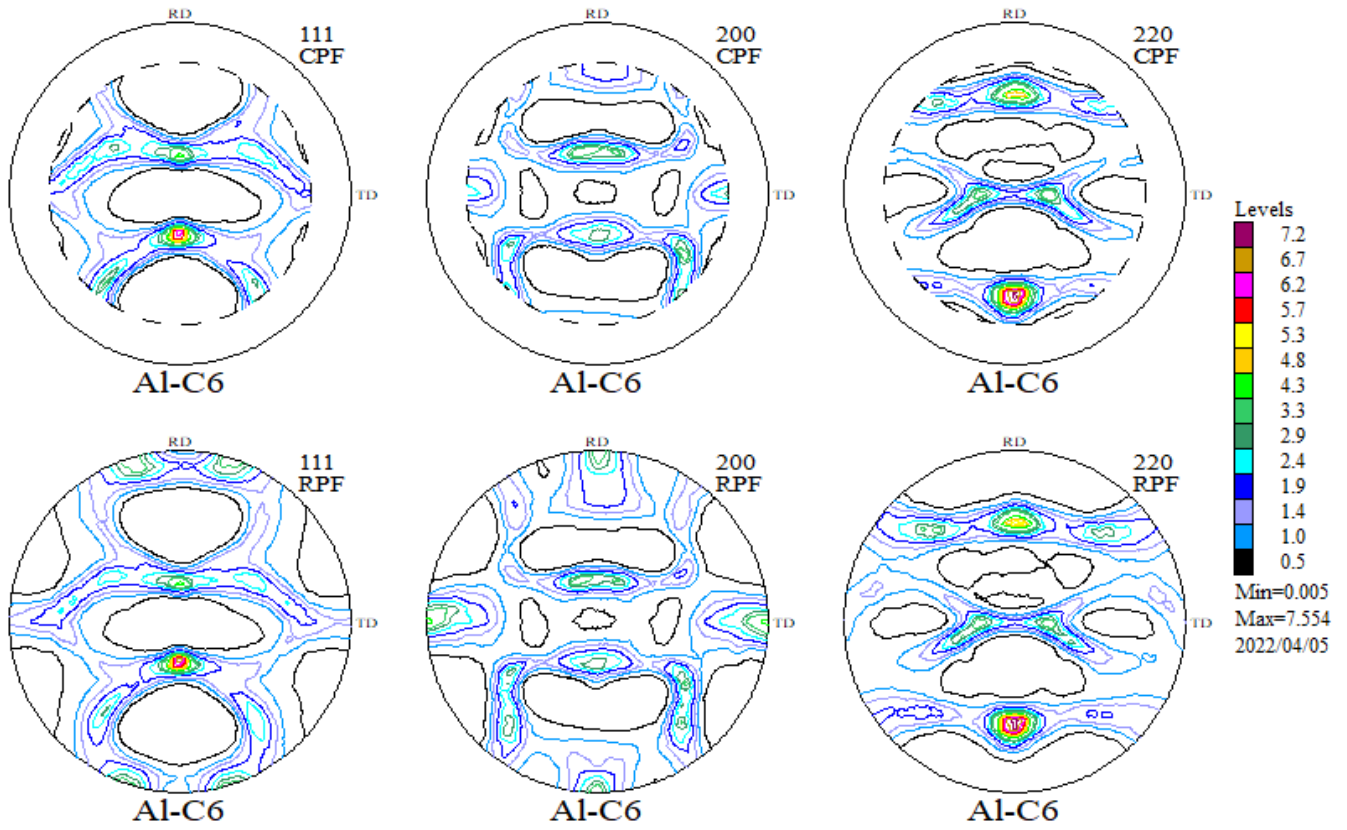
ご要望では、φ₁=0→360, Φ=0→180, φ₂=0→90としていますが、

Cubicをtriclinicで解析を行うと

φ₁=0→360, Φ=0→90, φ₂=0→180が得られます。

CubicをTetragonalで解析を行えば、ご要望範囲が得られます。

CubicをCubicの非対称で計算 (ϕ_1, Φ, ϕ_2) = (360, 90, 180)



CubicをTetragonal C4で計算 (ϕ_1, Φ, ϕ_2) = (360, 180, 90)

