

e u l e r 角度ズレとV o l u m e F r a c t i o n

2 0 2 5 年 0 4 月 1 9 日

HelperTex Office

概要

XRDにて極点図からVolume Fractionを求める場合、euler角度のシフトが発生している場合がある。

以下にcopper (90. 0、35. 26, 45. 0) 方位にて各euler角度のシフトを発生させ、Volume Fracationを求めてみます。

copper (90. 0、35. 26, 45. 0)

f1-3 (87. 0, 35. 26, 45. 0)

F-3 (90. 0、32. 26, 45. 0)

f2-3 (90. 0、35. 26, 42. 0)

all (87. 0、32. 26, 42. 0)

LaboTexにシスト方位の登録

Orientations Type Database

Crystal Symmetry Systems: Cubic Number of Orientations: 26

Database

No	Orientation Type Name	φ_1	Φ	φ_2
18	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R	-46.91	36.70	26.57
19	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1	27.03	57.69	18.43
20	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	52.87	74.50	33.69
21	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3	58.98	36.70	63.43
22	{ 2 3 1 } < -3 4 -6 > S-4	-127.13	74.50	33.69
23	{ 87.00, 35.26, 45.00 } f1-3	87.00	35.26	45.00
24	{ 90.00, 32.26, 45.00 } F-3	90.00	32.26	45.00
25	{ 90.00, 35.26, 42.00 } f2-3	90.00	35.26	42.00
26	{ 87.00, 32.26, 42.00 } all	87.00	32.26	42.00

Delete Edit New New {HKL}<UVW>

Orientation Euler Angles

☐ Fiber

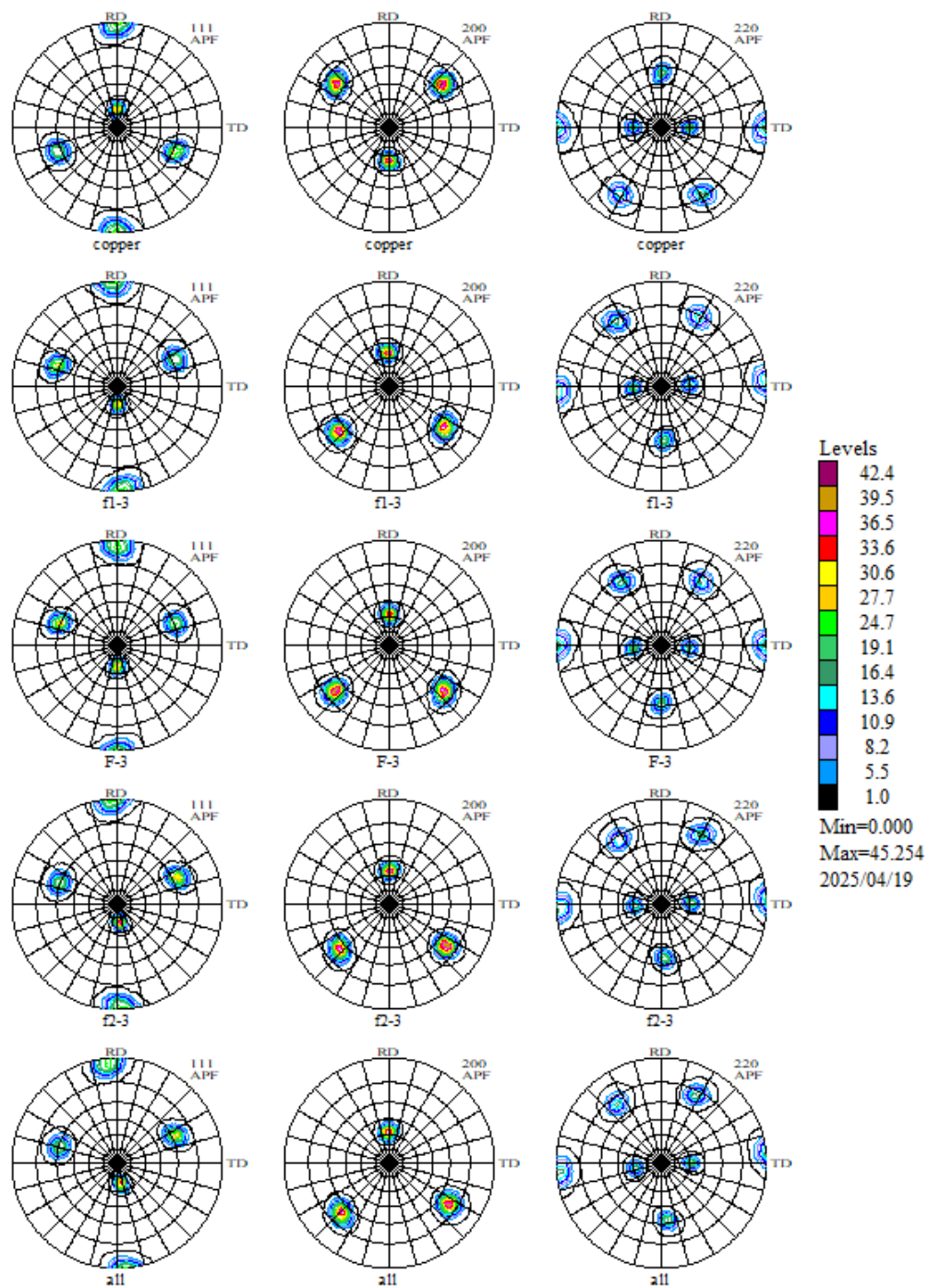
----- Orientation Type Name -----

Angle Part	Name	φ_1 (-360 - 360)	Φ (-180 - 180)	φ_2 (-360 - 360)
{ 0.0, 0.0, 0.0 }				

Add/Change Cancel

Close

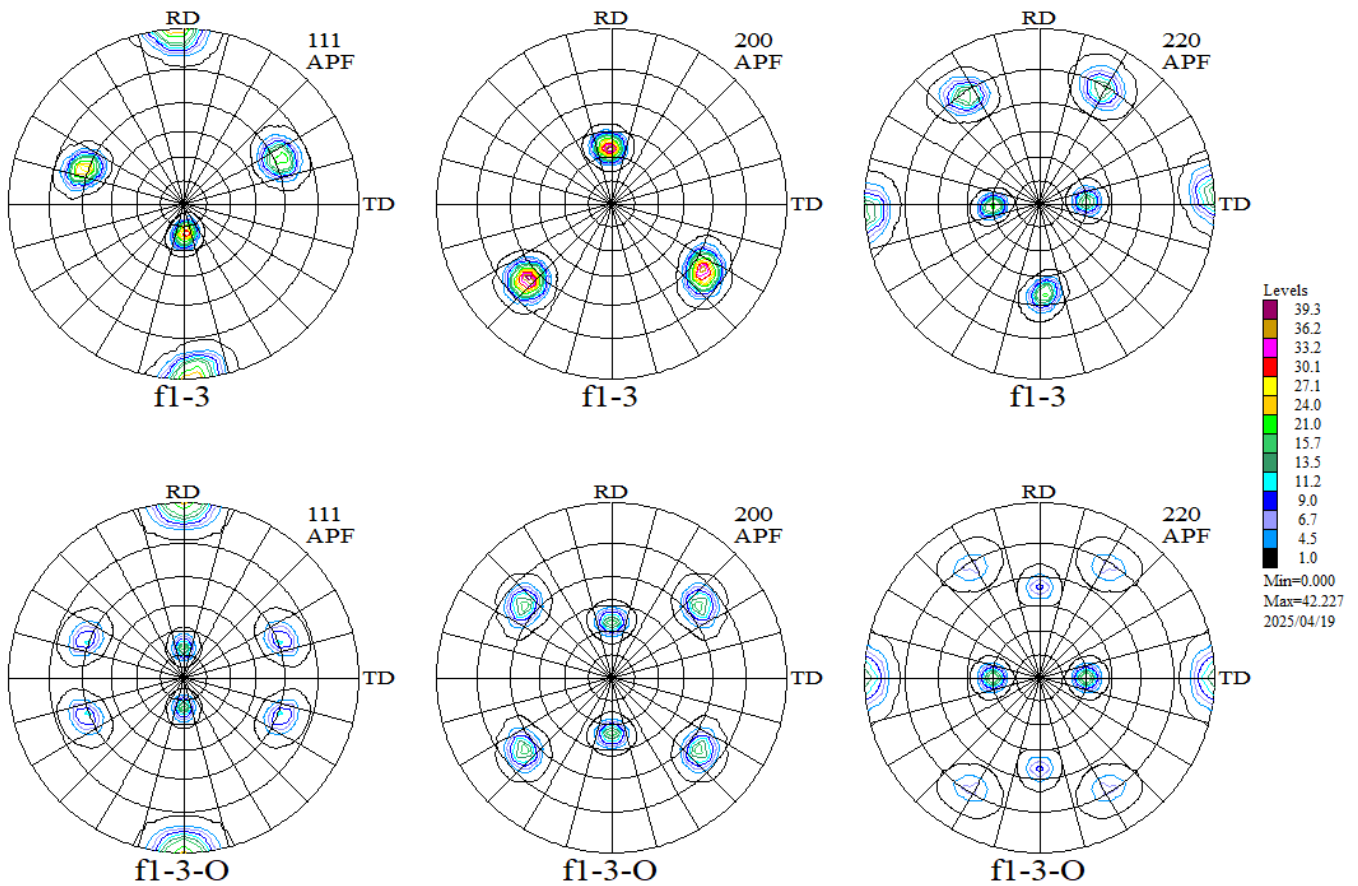
各方位から極点図作成



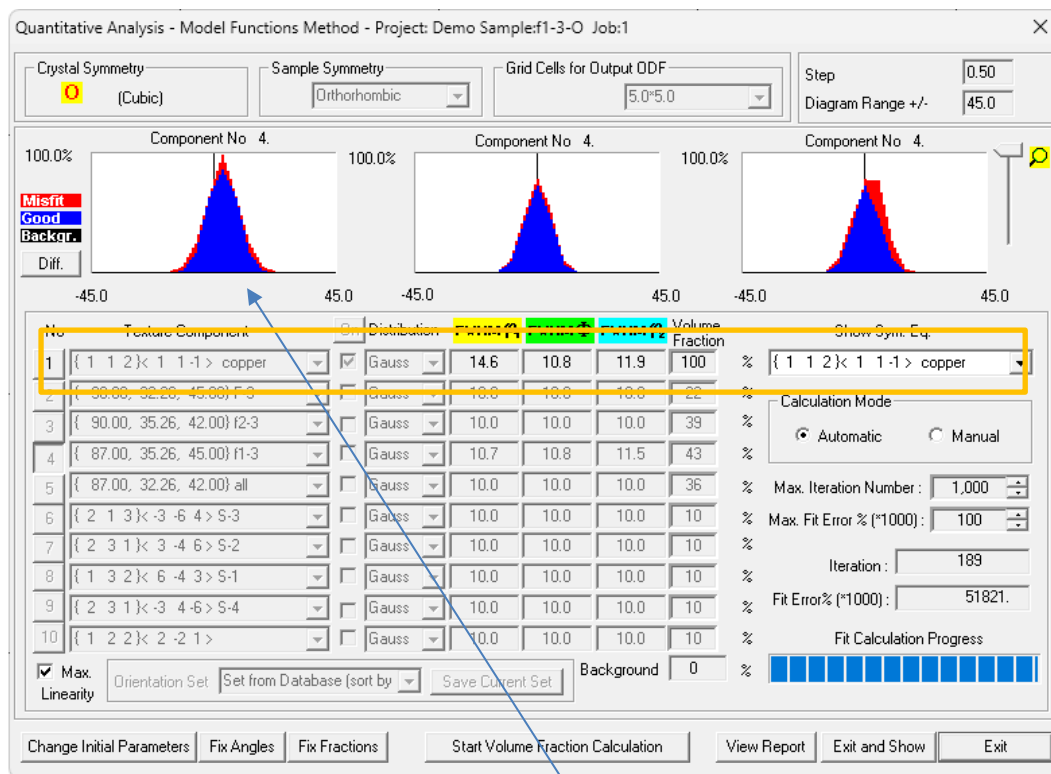
T r i c l i n i c 表記ではシフトが分かりやすい

X R D で測定すると、対称極点図が測定され、シフトが広がりにより変わり分かり難い

f 1-3 (87.0, 35.26, 45.0) Orthorhombic



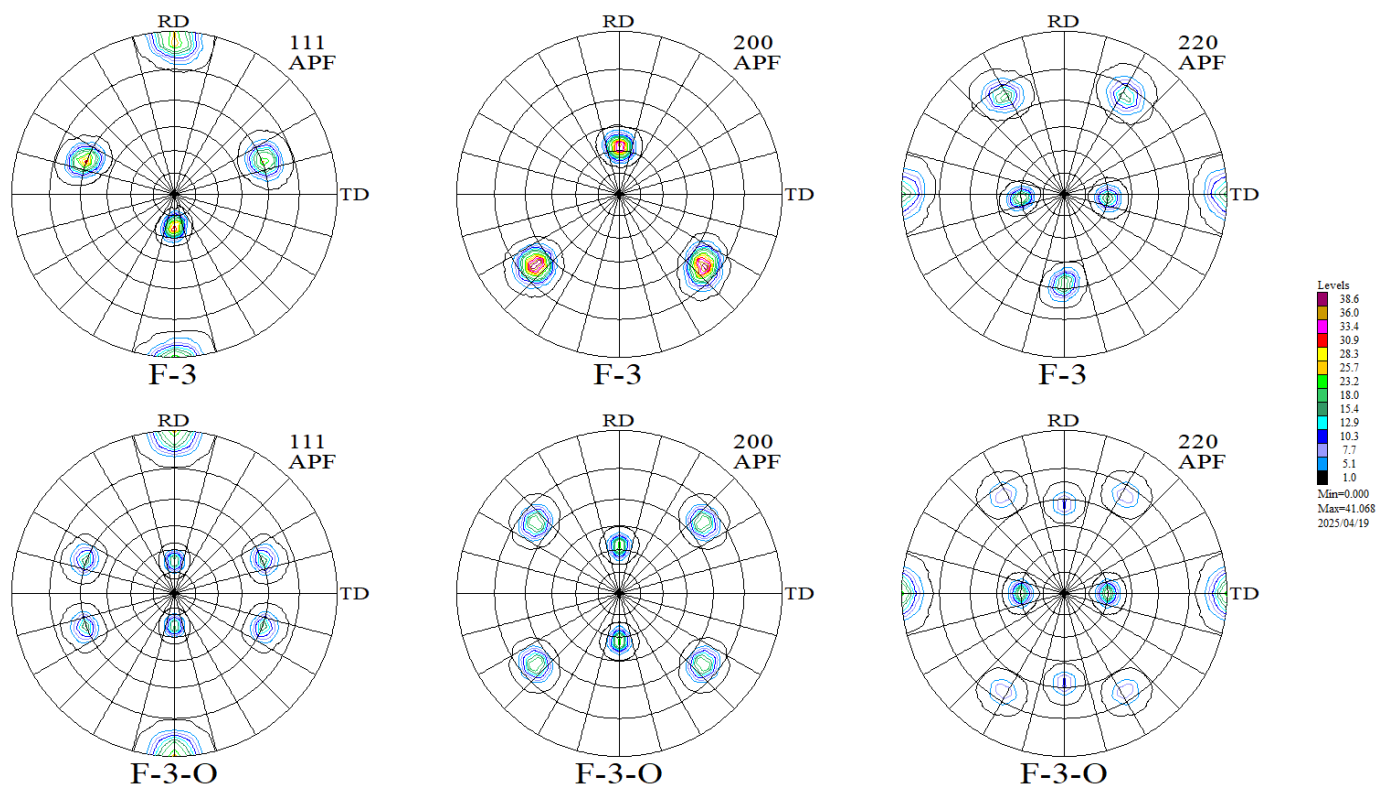
OrthorhombicをcopperでVolumeFraction計算



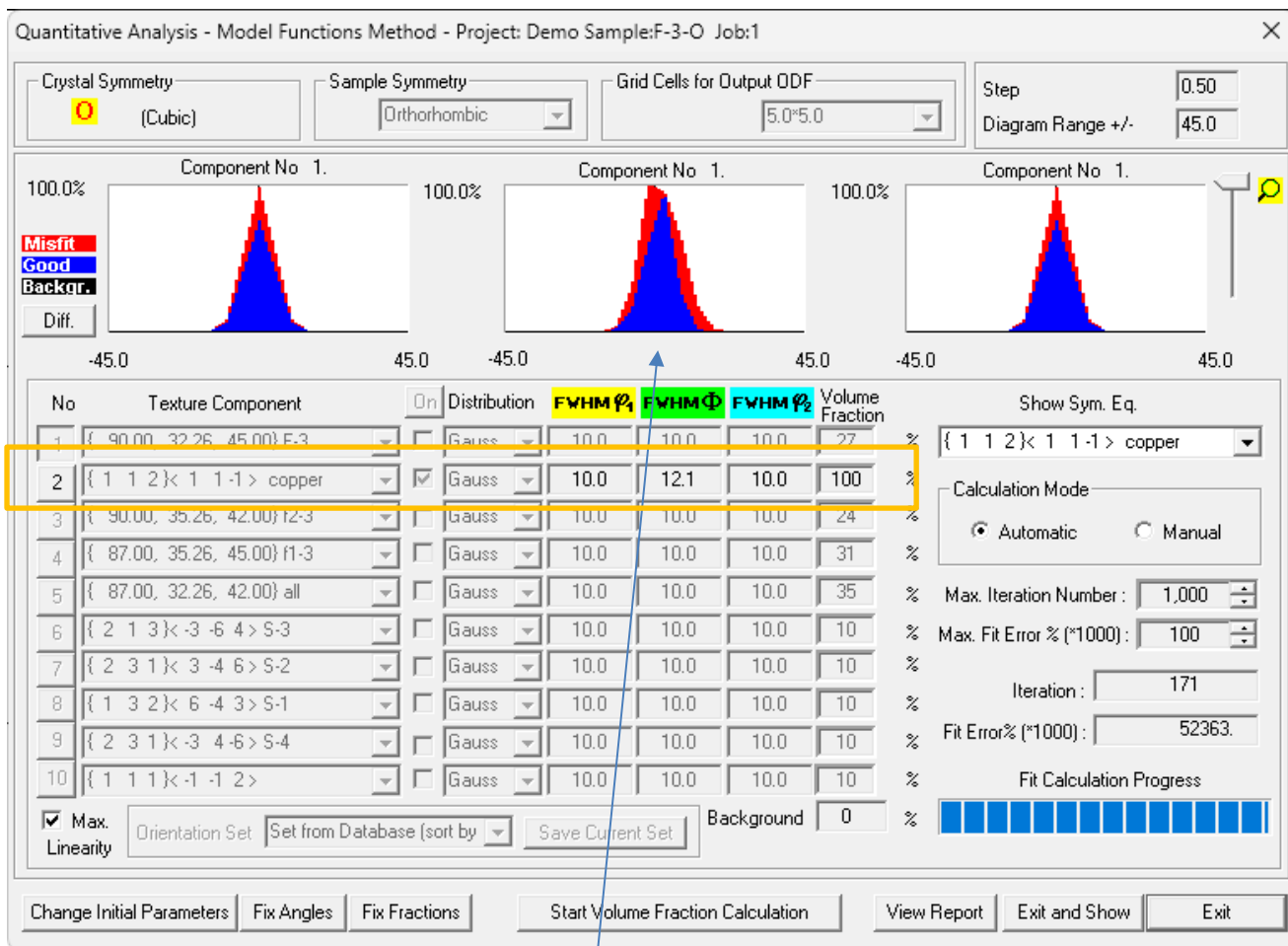
copper 100%で計算される。(f 1をシフトして計算されている)

Triclinicのままでも同一結果が得られる。

F-3 (90. 0、32. 26, 45. 0) のOrthorhombic



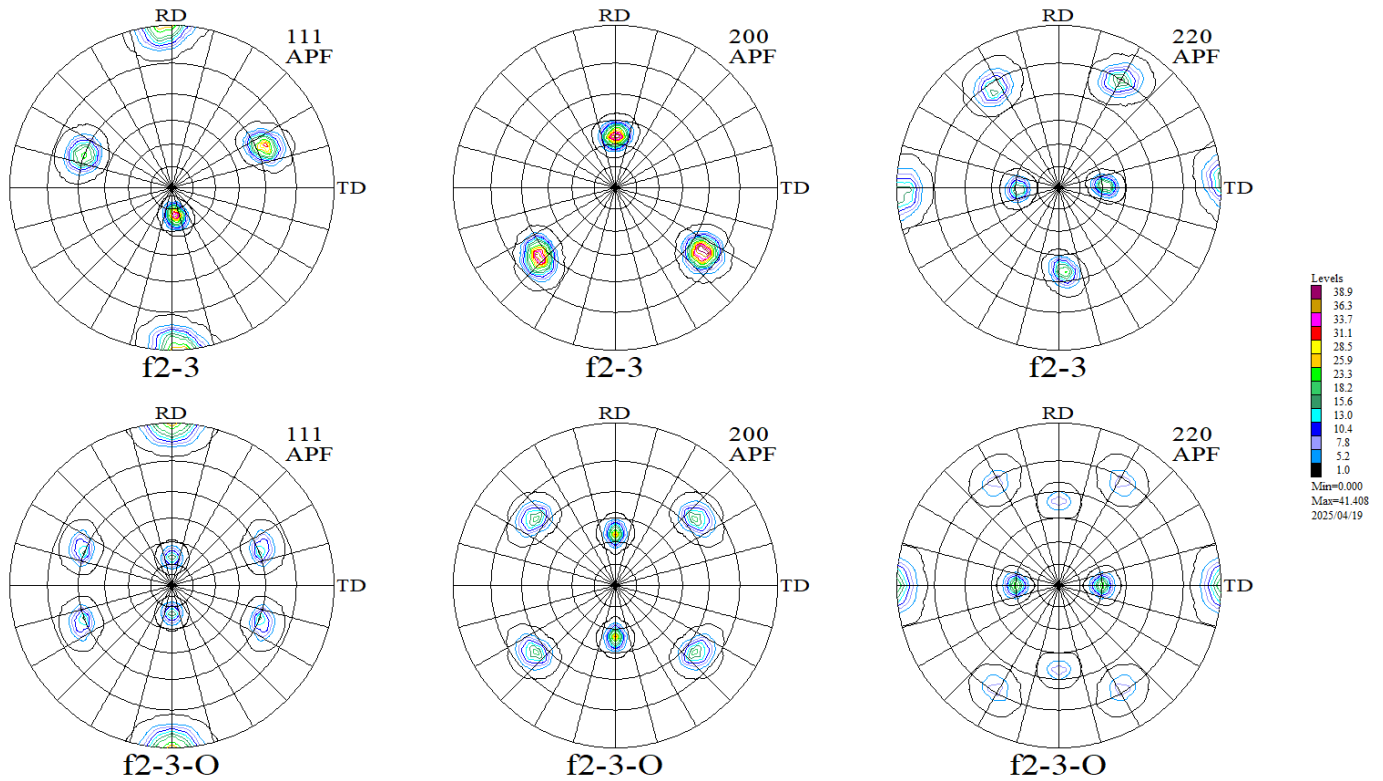
OrthorhombicをcopperでVolumeFraction計算



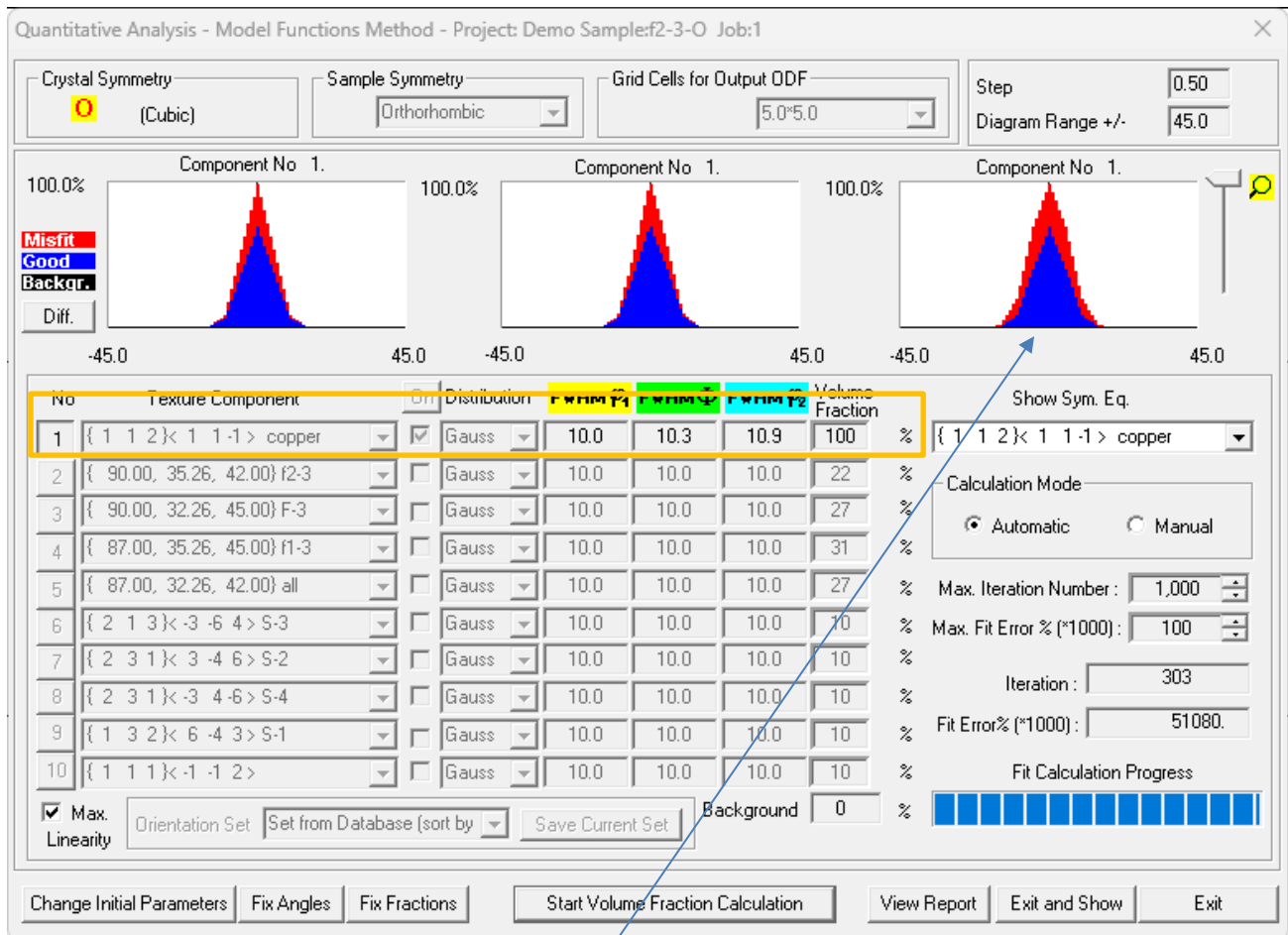
copper 100%で計算される。(Fをシフトして計算されている)

Triclinicのままで同一結果が得られる。

f 2-3 (90. 0、35. 26, 42. 0) のOrthorhombic



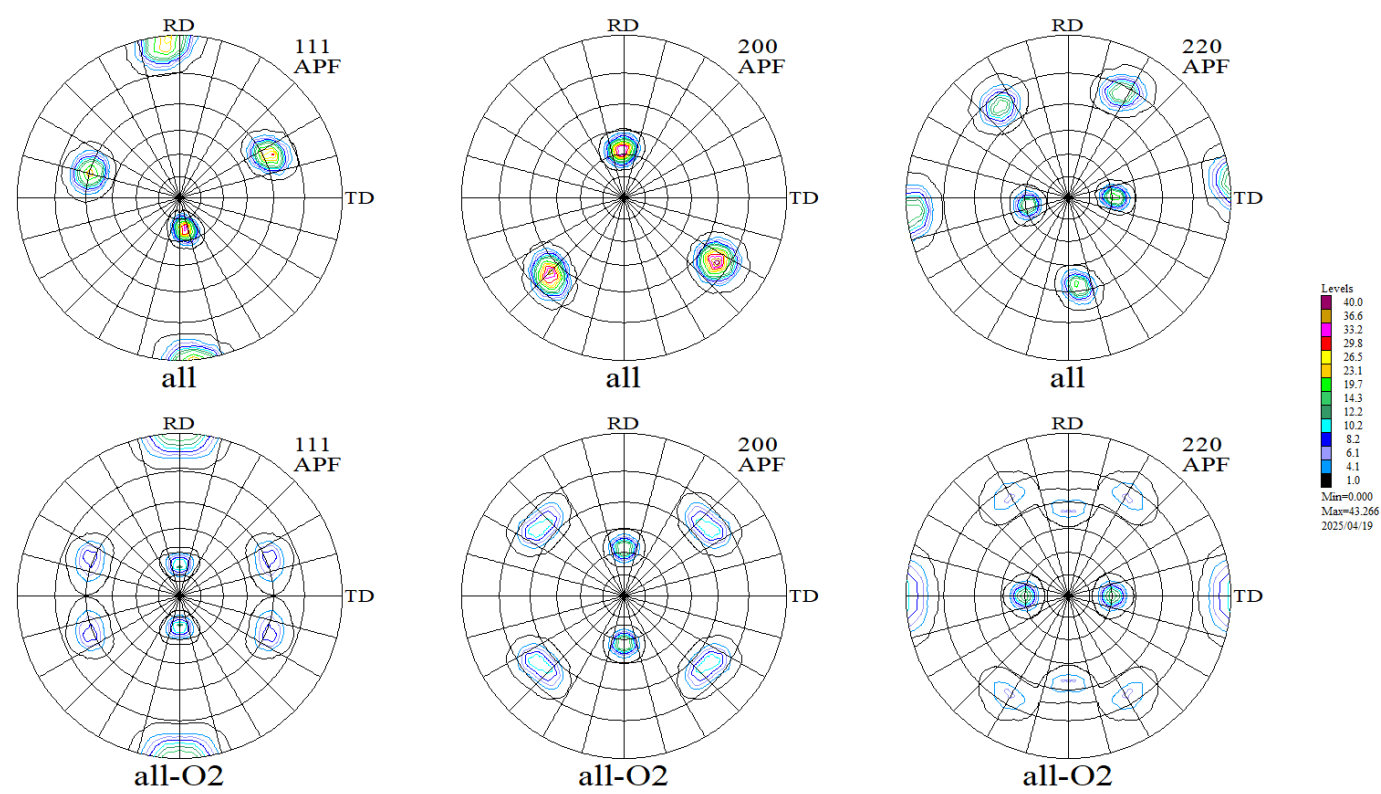
OrthorhombicをcopperでVolumeFraction計算



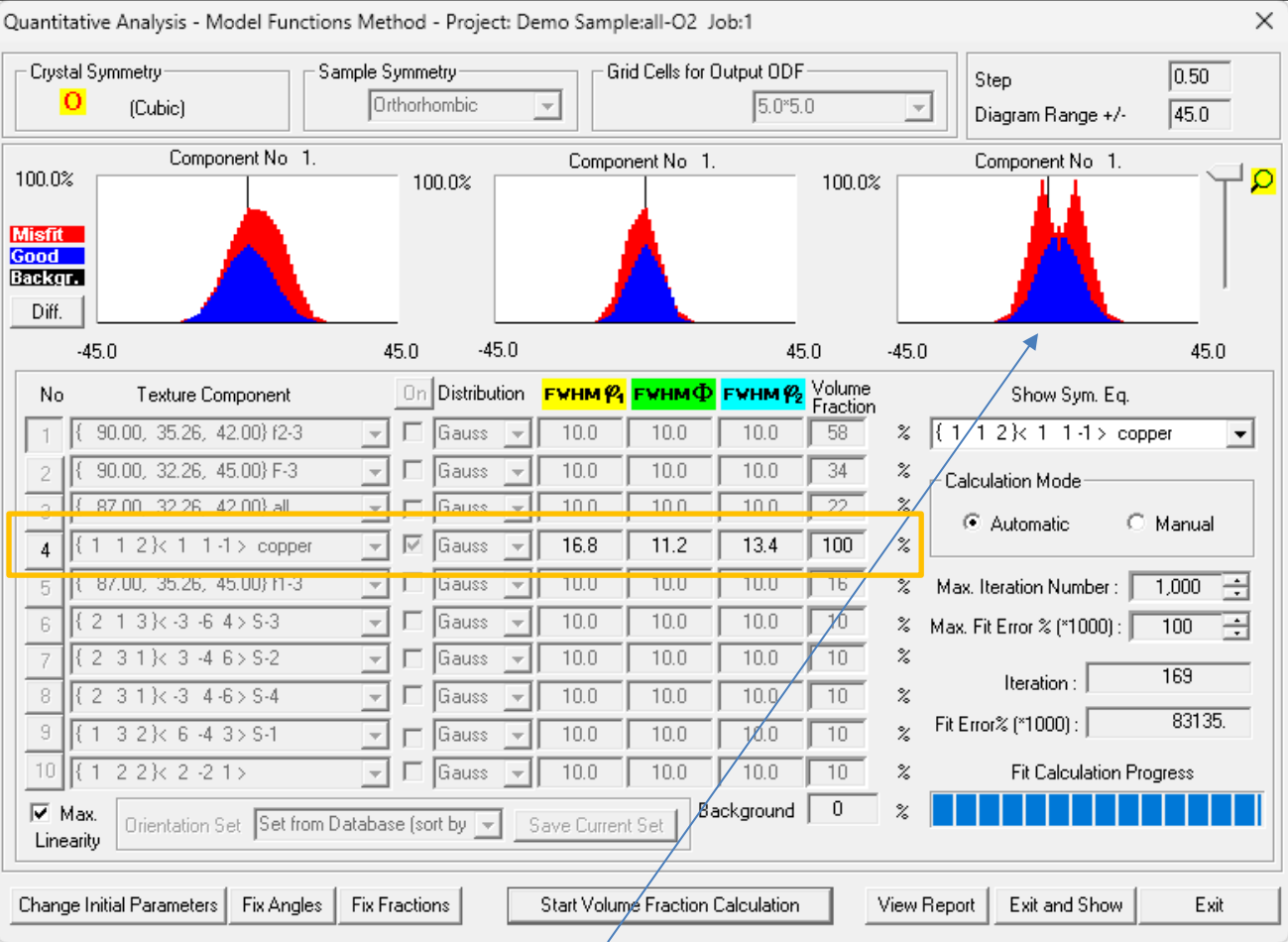
copper 100%で計算される。(f 2をシフトして計算されている)

Triclinicのままでも同一結果が得られる。

allのOrthorhombic



OrthorhombicをcopperでVolumeFraction計算



copper 100%で計算される。(f2をシフトして計算されている)

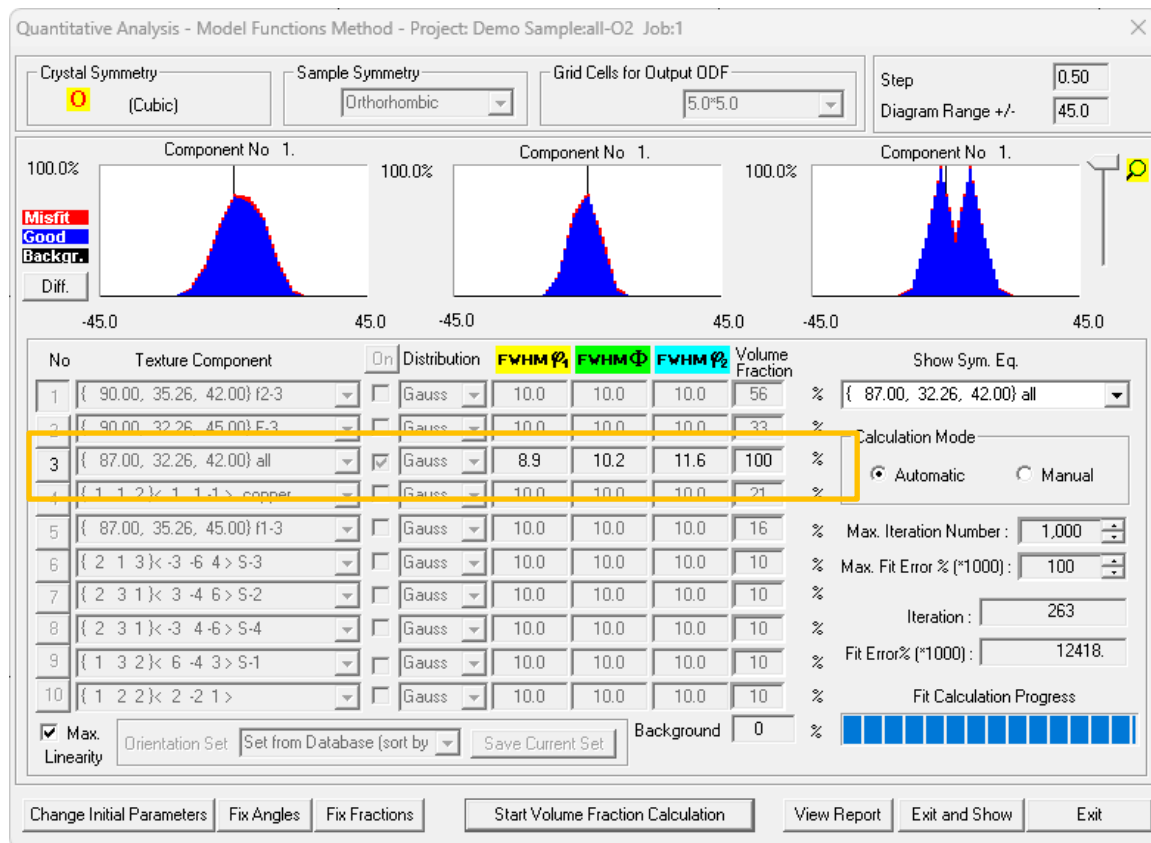
Triclinicのままで同一結果が得られる。

まとめ

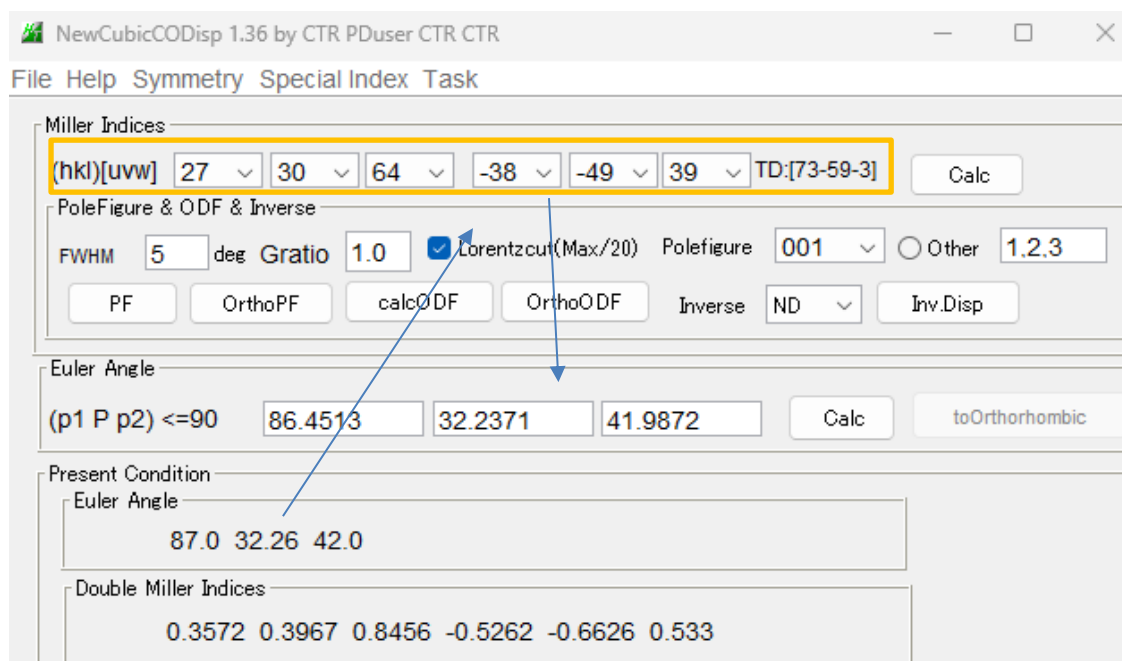
L a b o T e x では、指定した方位の近傍の方位に対し、e u l e r 角度を自動的にシフトして F i t t i n g が行われています。

しかし、正しい方位をしていた場合、指定した方位で F i t t i n g が行われる。

例えば a 1 1 に関して、先ほどは c o p p e r で 1 0 0 % が得られたが、a 1 1 でも 1 0 0 % が得られます。



a 1 1 の方位は



しかし、a 1 1 の方位より c o p p e r 近傍が扱い易い。