

MTEXでTetragonal材超電導材料のLaFePO材のシュミレーション

2020年10月31日

*HelperTex Office*

## 概要

Tetragonal材として、LaFePOを対象として、ダミーのファイルを指定しCIFファイルに、LiFePO<sub>4</sub>を指定、内部で(111)[1-43]を与え、ODF図と逆極点の評価を行ってみます。

CrystalOrientationDisp 2.05ST[20/12/31] by CTR

File Help Symmetry Special Index

Material

Material Tetragonal LaOFeP

1.0 1.0 2.148 90.0 90.0 90.0

Miller Indices

(hkl)[uvw] 1 1 1 1 -4 3 Calc

Euler Angle

(p1 P p2) <=90 62.4701 71.7756 45.0 Calc

Present Condition

Euler Angle

62.4701 71.7756 45.0

Double Miller Indices

0.6716 0.6716 0.6716 0.1307 -0.5229 0.3922

DISP

Position 10 Disp size 400 DISP

BG color Black Line size 2.0 Minus

OK Return Structure

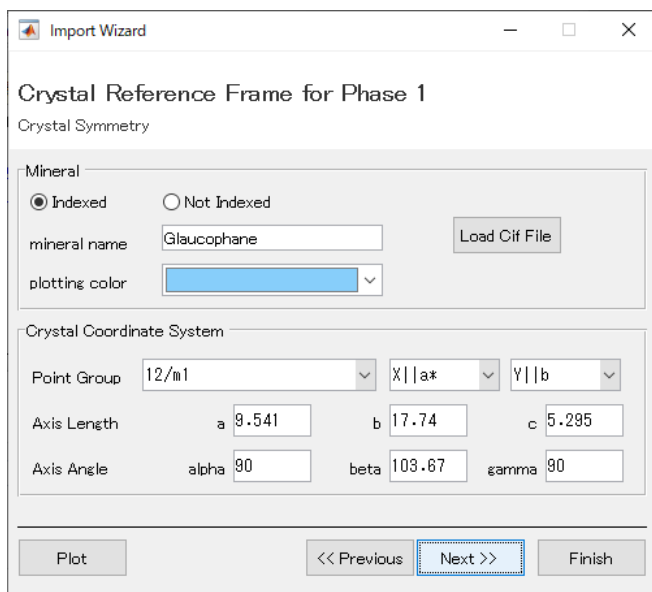
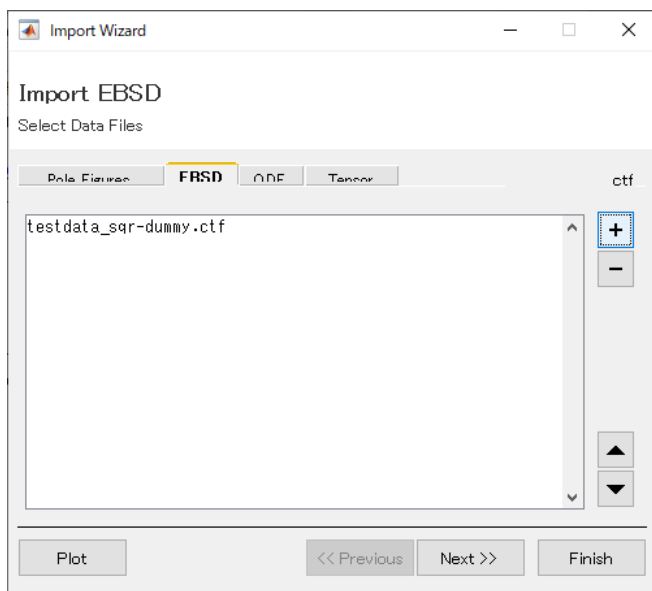
GPIverseDisplay (Ver1.43) で MTEXTetoragonal(91\*46)に対応

## 評価結果

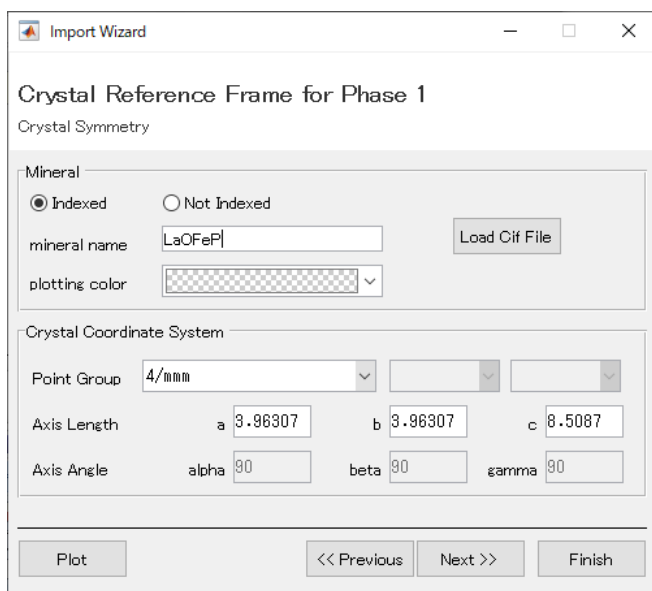
ODF図、逆極点図、どちらからでも入力された {111} <1-43>が計算されます

Cubic, Hexagonal, Orthorhombic同様Tetragonalも  
MTEX<->CTRで評価できます。

MTE Xに適当なファイルを指定



c i fファイル指定



```

% crystal symmetry
CS = {...
    'notIndexed',...
    crystalSymmetry('4/mmm', [4 4 8.5], 'mineral', 'LaOFeP')};

```

ワークスペース	
名前 ▲	値
CS	1x2 cell
ebstd	900x1 EBSD
fname	'U:\EBSD-MTEX\LaFePO-Tetragonal-rotation\testdata_sq-dummy.ctf'
pname	'U:\EBSD-MTEX\LaFePO-Tetragonal-rotation'

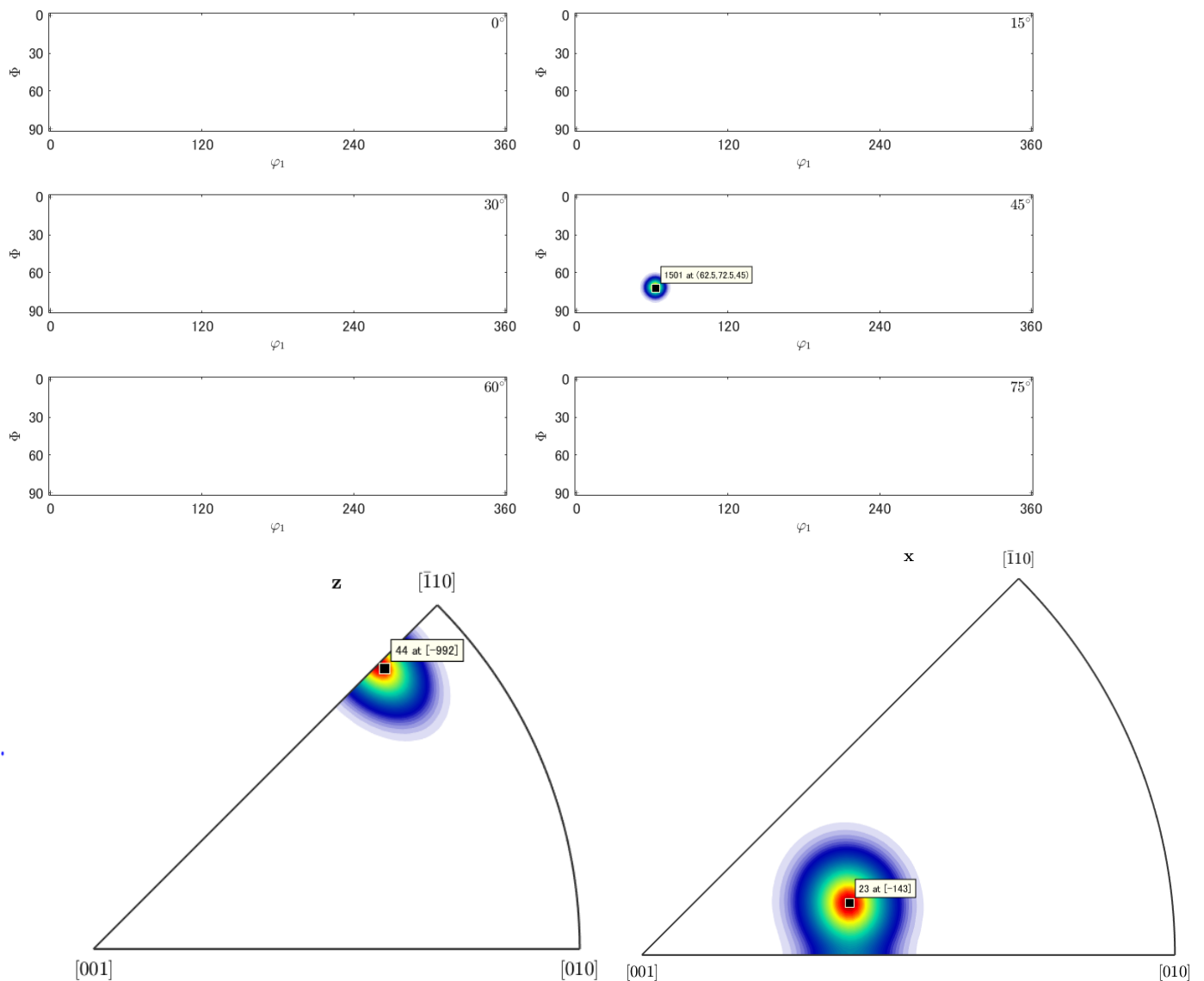
方位の作成

```

>> cs=ebstd('LaOFeP').CS
>> ori = orientation.byMiller([1 1 1],[1 -4 3],cs)
>> psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)
>> odf= unimodalODF(ori,psi)

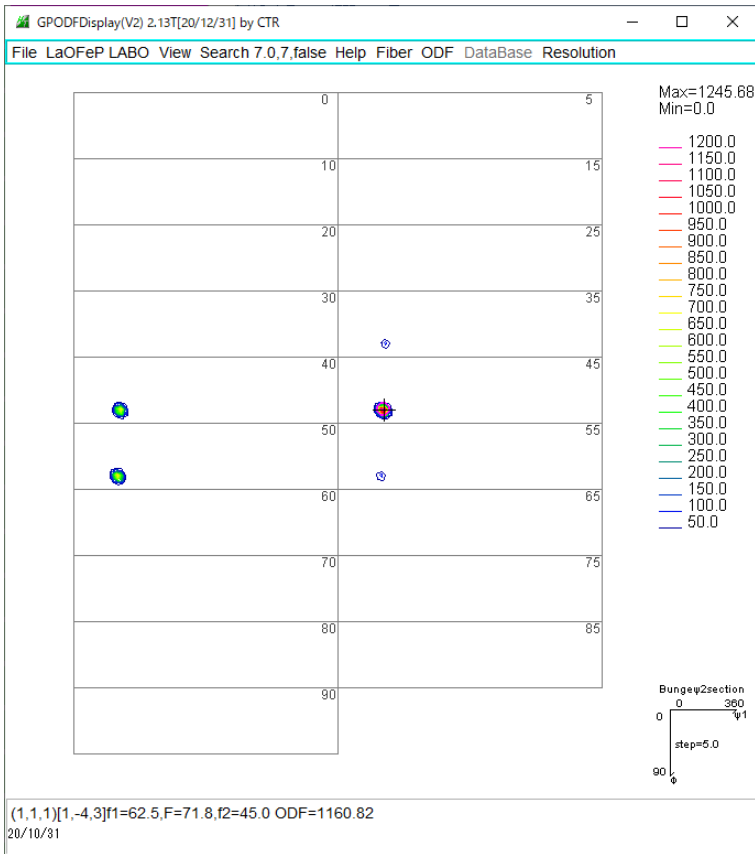
```

ODF 図

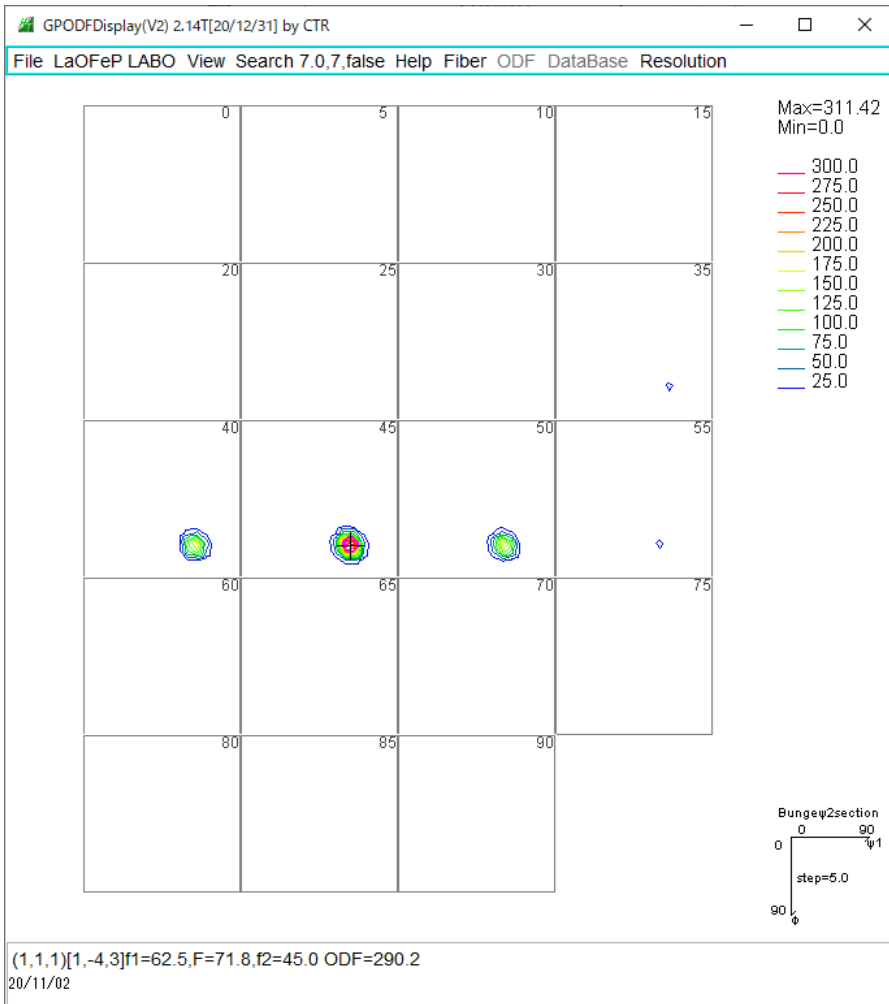


逆極点図は、Direction で表示されているため、(111)が[991]と表示されています。

# ExportされたODF図



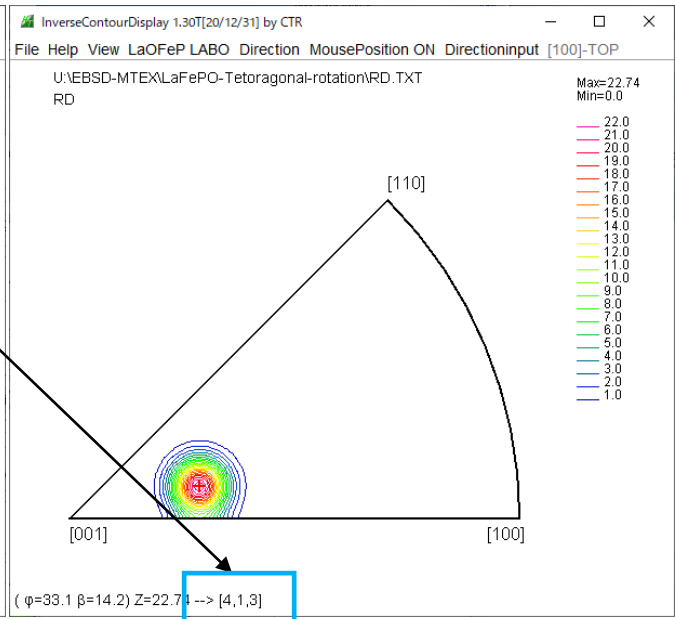
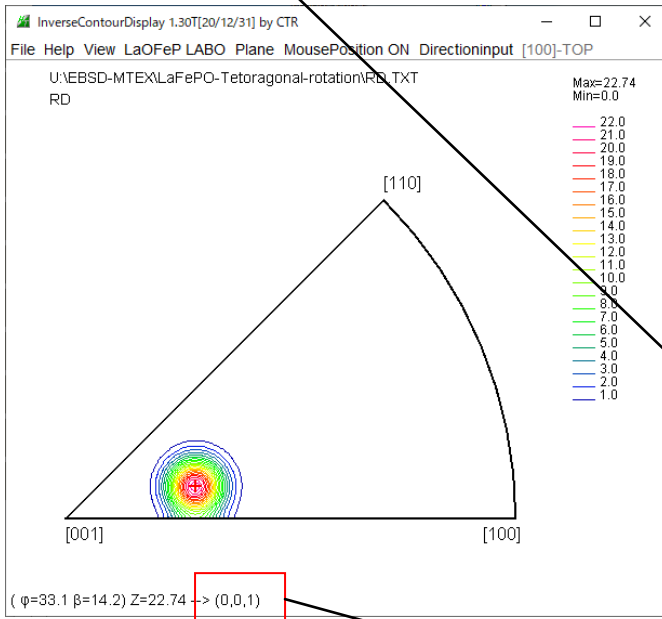
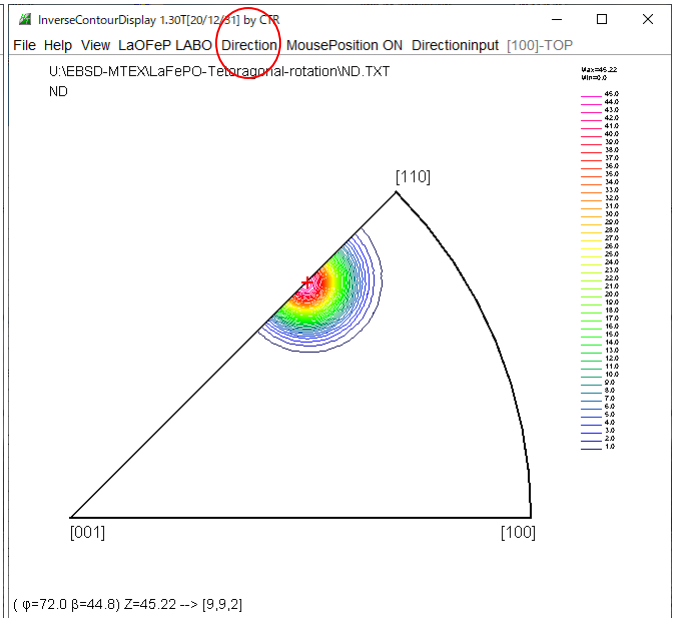
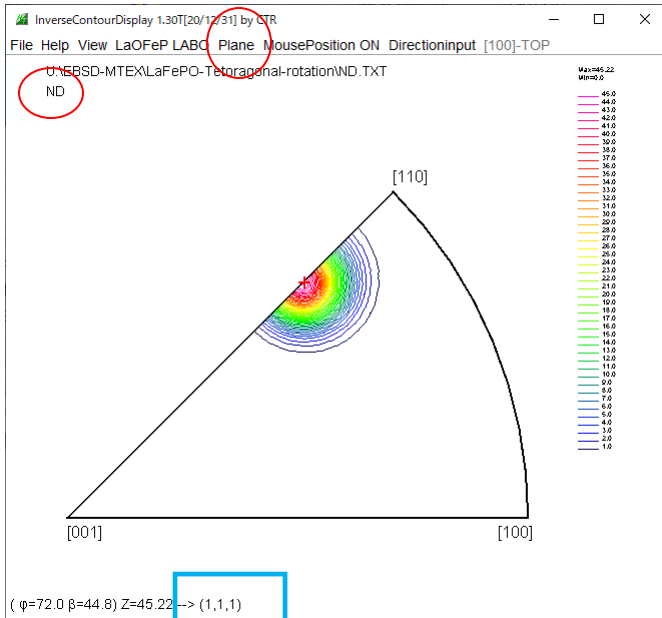
## 1 / 4 対称



逆極点図

Plane表示

Direction表示



InverseDirection 1.17T[20/12/31] by CTR

File Help

Max index: 15

Method: Plane

Material: LaOFeP.txt LaboTextMode

φ: 32.31 β: 14.04   Center[001]

X Axis: [11-20]

32.31 14.04 --> (4 1 14)

Plane

h: 4 k: 1 l: 14

h: 0 k: 0 l: 0 i: 1

Direction

Max index: 15 32.31 14.04 --> [4 1 3]

Plane を、(0,0,1)と計算している理由はリアルタイム計算時、MaxIndex を小さくしているためで Directioninput から角度入力で、Plane を計算すると正規な値が計算されます。