

C u b i c における非対称ODF解析

2022年04月17日

HelperTex Office

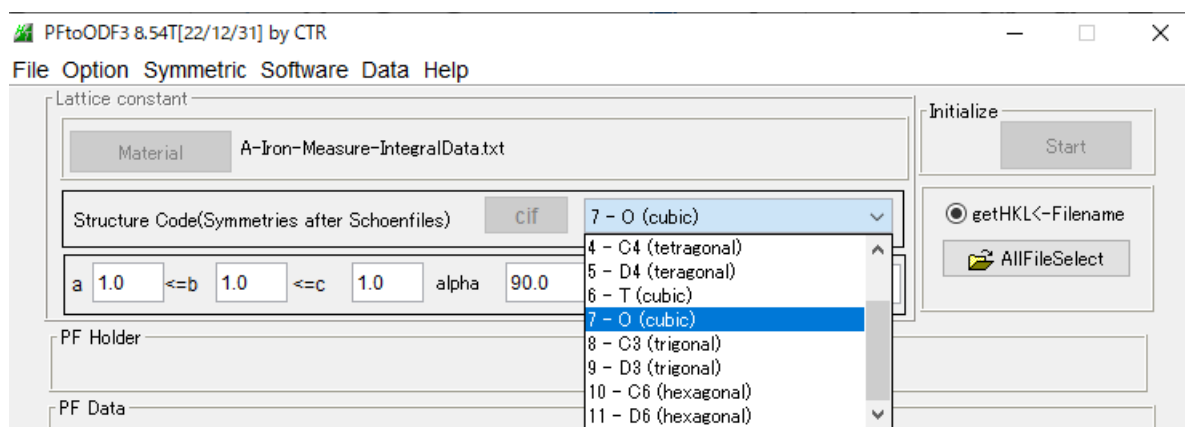
概要

ODF解析では対称性により指定するパラメータが異なる。

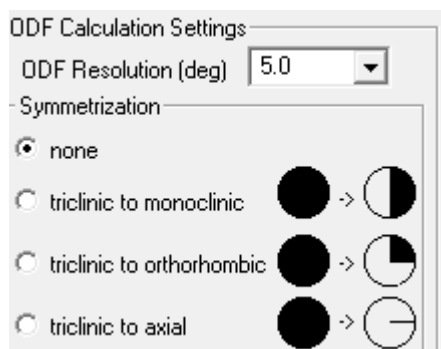
Symmetry	Cubic**		Hexagonal		Tetragonal		Trigonal		Ortho- rhom- bic	Mono- clinic	Triclinic
	O	T	D ₆	C ₆	D ₄	C ₄	D ₃	C ₃	D ₂	C ₂	C ₁
LaboTex structure code	7	6	11	10	5	4	9	8	3	2	1
φ ₁	triclinic* (C ₁)	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°	360°
	monoclinic* (C ₂)	180°	180°	180°	180°	180°	180°	180°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

LaboTexの場合、PFtoODF3ソフトウェアで以下のパラメータを指定する。

このパラメータは、材料により決められたパラメータで、cif選択で自動的に選択されるあるいは指定する。



更に対称指定はLaboTex内部で指定する。



今回、MTEXによる非対称指定でODF図がどのように変化するか確かめてみます。

MTEXもcif指定でstructure codeは自動的に決定される。

MTEXの対称指定は

SS = specimenSymmetry('1')

triclinic

SS = specimenSymmetry('2')

monoclinic

SS = specimenSymmetry('orthorhombic')

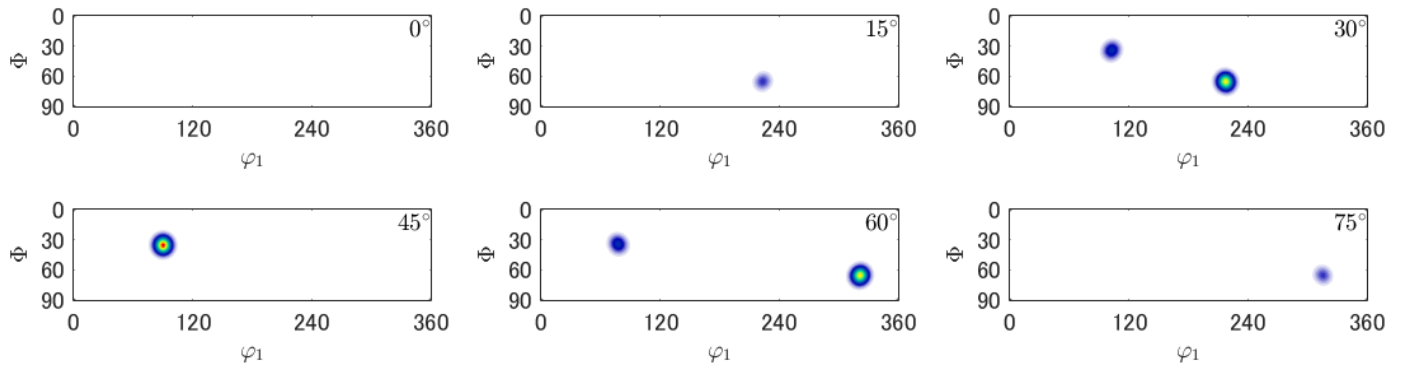
orthorhombic

で変更する

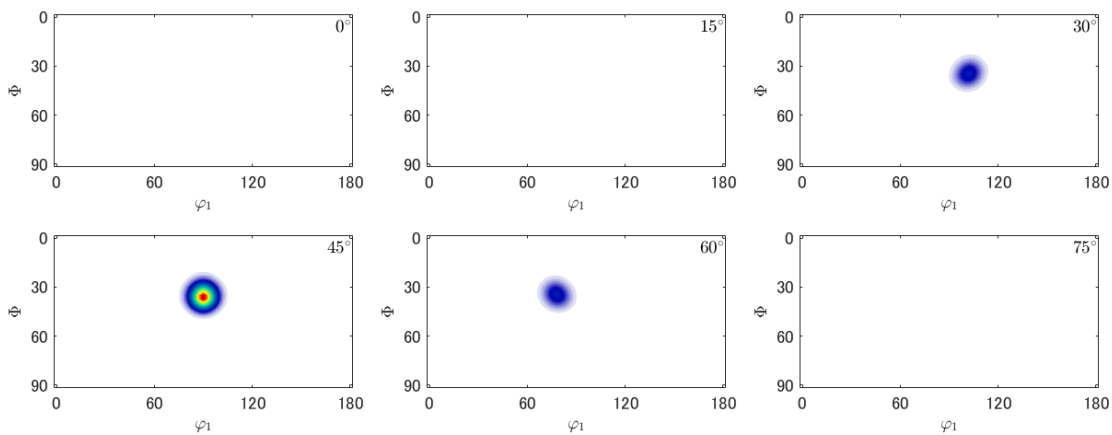
Cubic-O (7) を指定した場合 (A1.cif)

_space_group_IT_number が 203 → 230

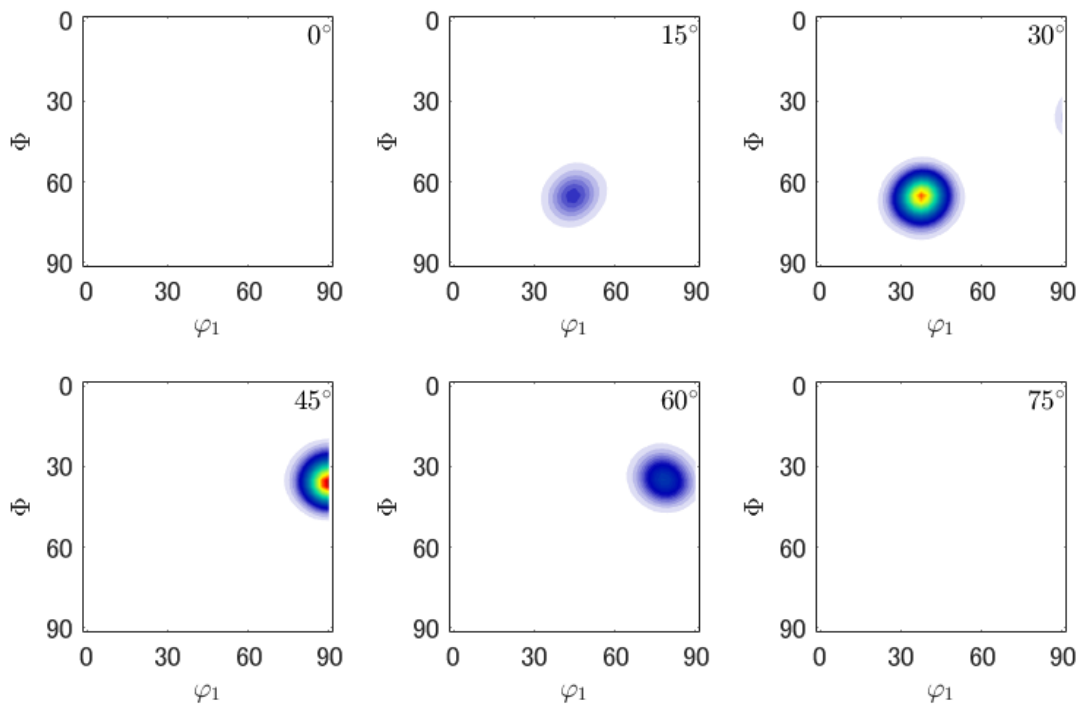
SS = specimenSymmetry('1') -> (360,90,90)



SS = specimenSymmetry('2') -> (180,90,90)



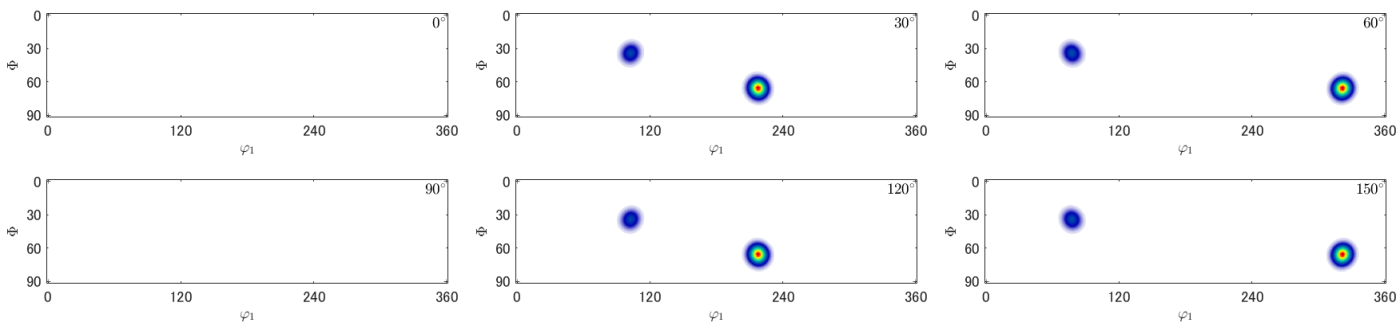
SS = specimenSymmetry('orthorhombic') -> (90,90,90)



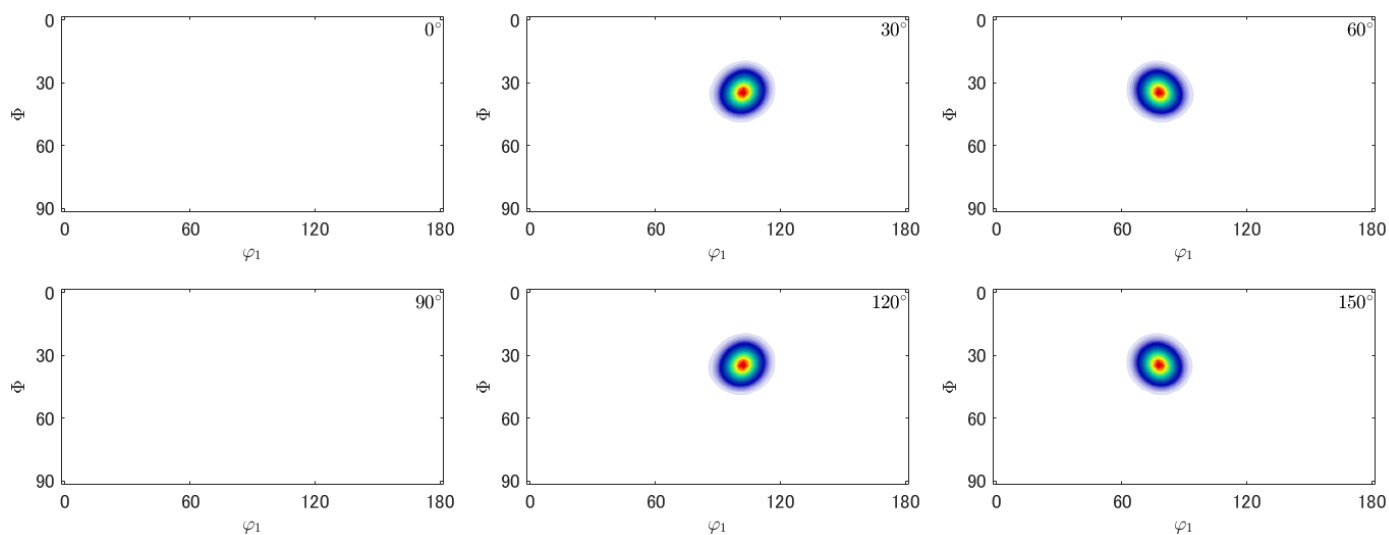
C u b i c - T (6) を指定した場合 (La2 Mo0.8 W1.2 O9 の c i f)

_space_group_IT_number が 1 9 5 - > 2 0 2

SS = specimenSymmetry('1') -> (360,90,180)



SS = specimenSymmetry('2') -> (180,90,180)



SS = specimenSymmetry('orthorhombic') -> (90,90,180)

