

Monoclinic-Polypropyleneの配向評価法

2013年12月15日

HelperTexOffice

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

概要

Polypropylene は Monoclinic の代表的な材料であるが、ODF 解析する場合、軸の取り方で 2 つの解析方法がある。B-Axis-setting(BS),C-Axis-setting(CS)である。

BS の格子定数は $6.63 \times 20.78 \times 6.5 \times 90 \times 99.5 \times 90$

CS の格子定数は $6.5 \times 6.63 \times 20.78 \times 90 \times 90 \times 80.5$ で表され、

BS->CS の変更する場合、指数は $h k l \rightarrow l - h k$ とする。

CS により、最長軸が c 軸となり、配向度関数評価は Hexagonal と同様に $\{001\}$ の評価となる。

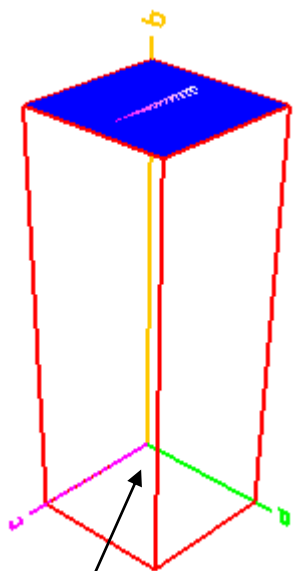
同一結晶方位でも BS, CS で $\{h k l\} \langle u v w \rangle$ は異なる。

たとえば、BS の $\{010\} \langle 001 \rangle$ 結晶方位は CS では $\{001\} \langle 100 \rangle$ となります。

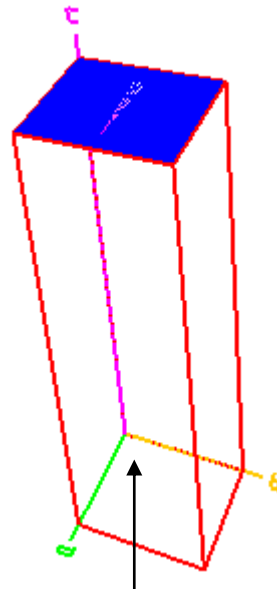
OrientationDisplay ソフトウェアで結晶方位図を表示

BS $\{010\} \langle 001 \rangle$ CS $\{001\} \langle 100 \rangle$

(a 軸 : 緑、b 軸 : 黄色 c 軸 : 紫)



β 角度は 99.5 deg



γ 角度は 80.5 deg

Polypropylene の格子定数と h k l を [MaterialData ソフトウェア](#) で表示

b-Axis-setting(BS)

α -Polypropylene

Monoclinic

6.63 (1.0)
 20.78 (3.1342)
 6.5 (0.9804)
 90.0
 99.5
 90.0
 1.54056

h	k	l	l/lo	d	2 θ
0	2	0	2.6	10.39	8.503
1	0	0	1.2	6.5391	13.53
1	1	0	100.0	6.2375	14.187
0	4	0	54.0	5.195	17.054
1	3	0	71.4	4.7549	18.645
-1	2	1	2.3	4.5126	19.656
1	1	1	36.9	4.1556	21.364
-1	3	1	70.4	4.0593	21.877
1	2	1	1.8	3.9267	22.626
1	3	1	3.7	3.617	24.592

c-Axis-setting(CS)

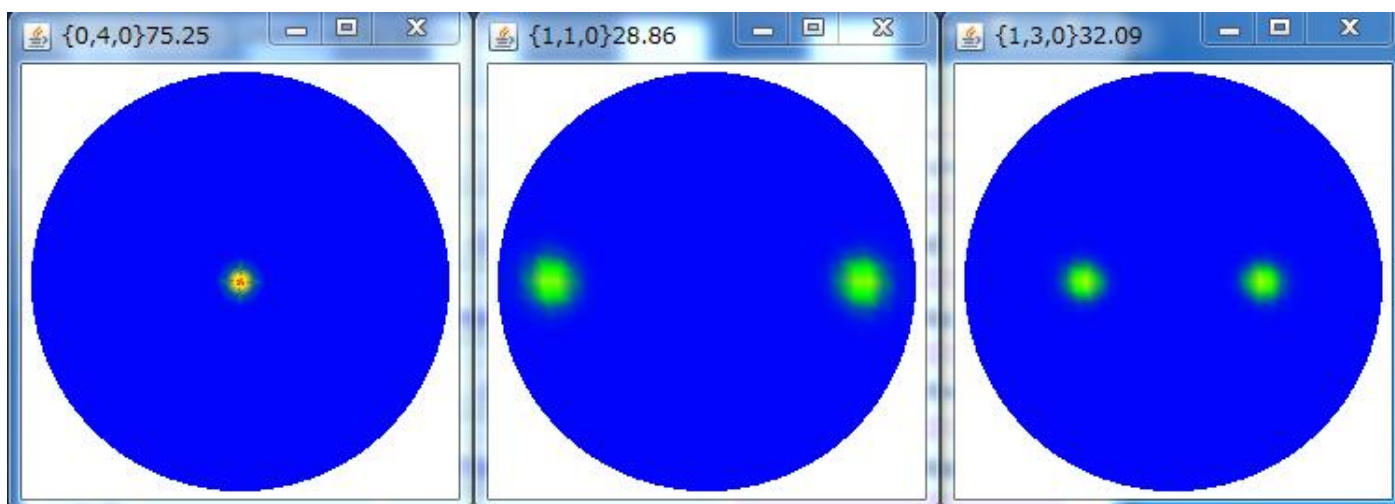
α -Polypropylene

Monoclinic

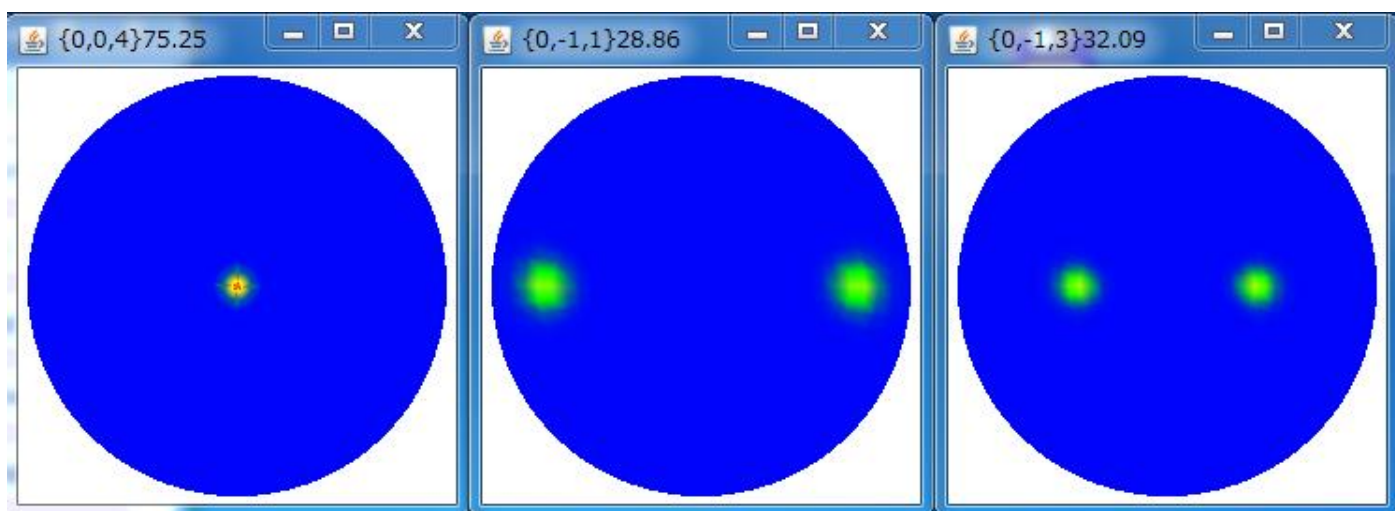
6.5 (1.0)
 6.63 (1.02)
 20.78 (3.1969)
 90.0
 90.0
 80.5
 1.54056

h	k	l	l/lo	d	2 θ
0	0	2	2.6	10.39	8.503
0	-1	0	1.2	6.5391	13.53
0	-1	1	100.0	6.2375	14.187
0	0	4	54.0	5.195	17.054
0	-1	3	71.4	4.7549	18.645
1	1	2	2.3	4.5126	19.656
1	-1	1	36.9	4.1556	21.364
1	1	3	70.4	4.0593	21.877
1	-1	2	1.8	3.9267	22.626
1	-1	3	3.7	3.617	24.592

{010}<001>結晶方位を BS で極点図を表示(GPPoleDisplay ソフトウェア)



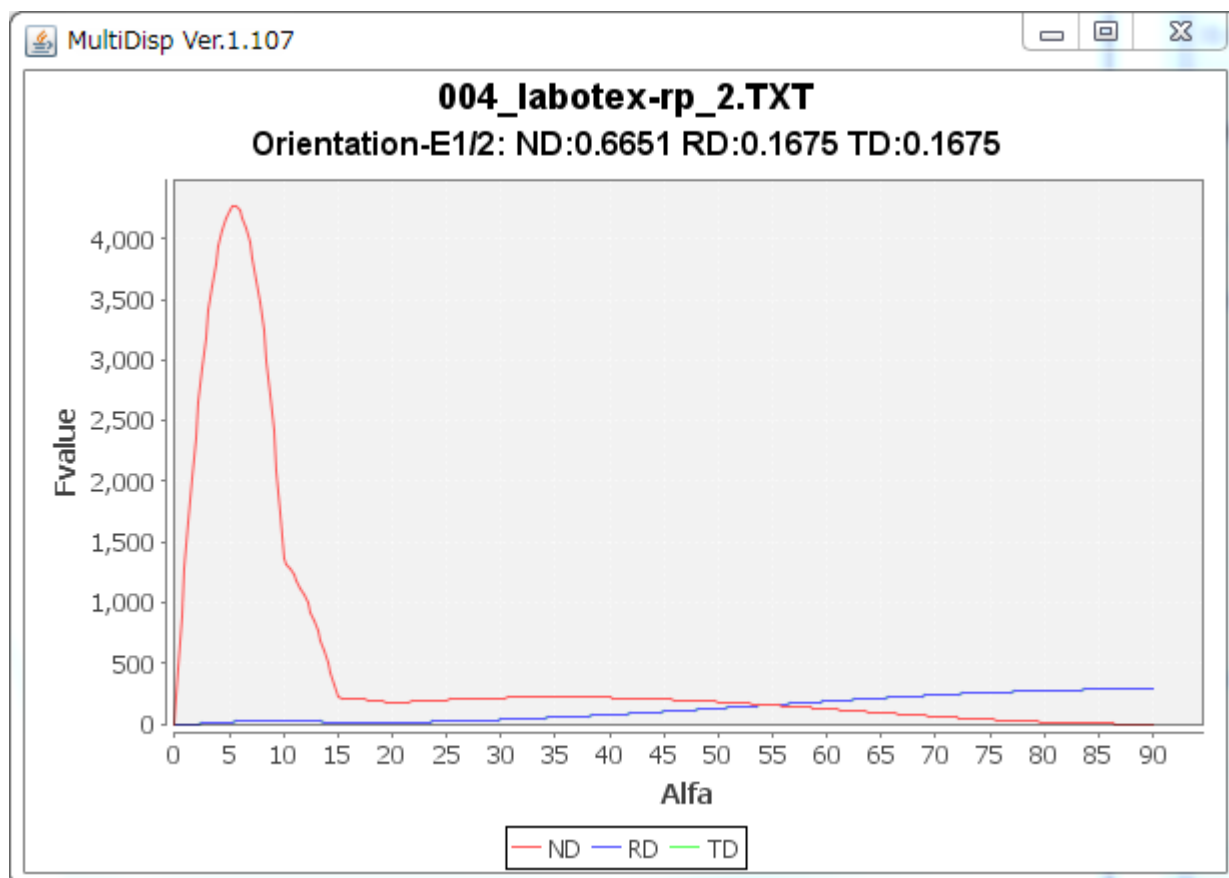
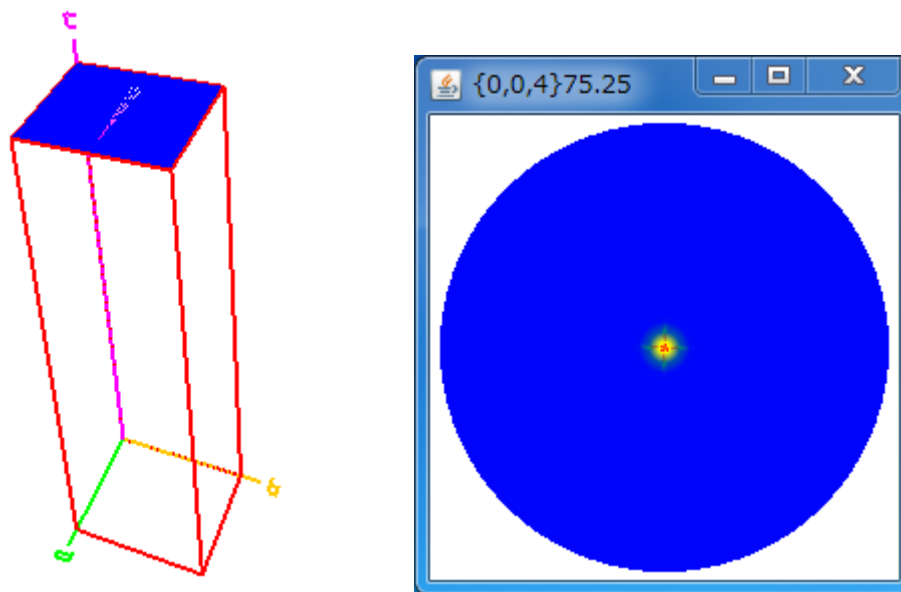
{010}<001>結晶方位を CS で極点図を表示(GPPoleDisplay ソフトウェア)



極点図の指数が $\{1-h\ k\}$ になります。

完全極点図から配向評価 (Orientation ソフトウェア)

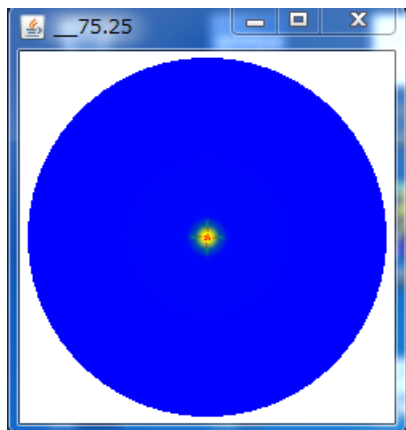
配向評価は、C軸方向に対する評価であるので、{0 0 1} 極点図を使う。



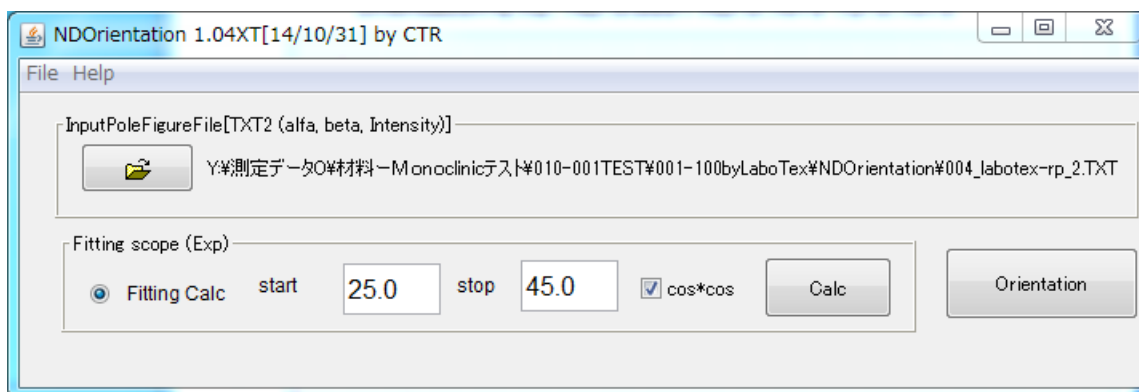
C軸方向にND方向の平行性が非常に強い。

不完全極点図から配向評価 (NDOrientation ソフトウェア)

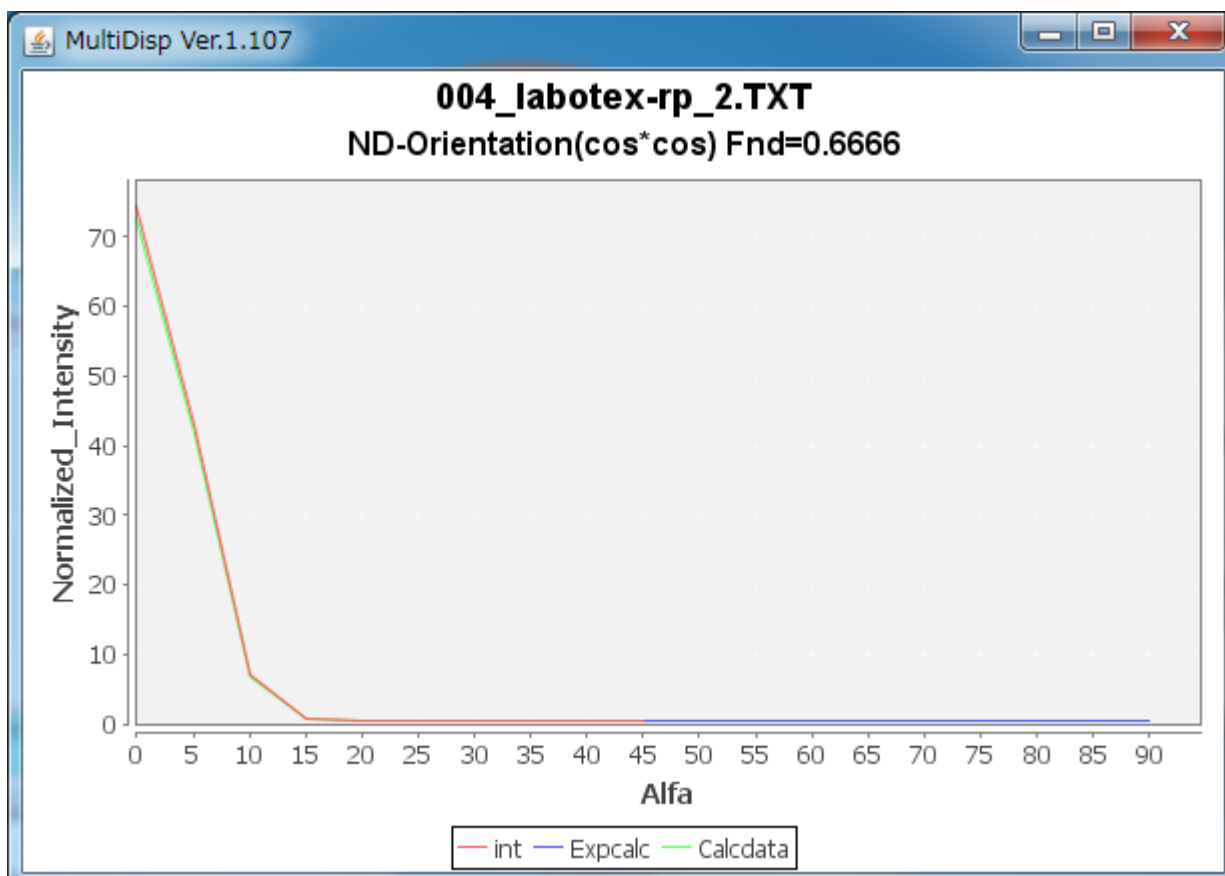
ほとんど、C 軸 $\{0\ 0\ 1\}$ 配向とした場合、極点図 $\{0\ 0\ 1\}$ では極点図の中心以外に極は存在しない
極点図の中心部分のみの極点図測定データを用いて、軸配向を調べます。



極点図は、中心から 4 5 度のデータ

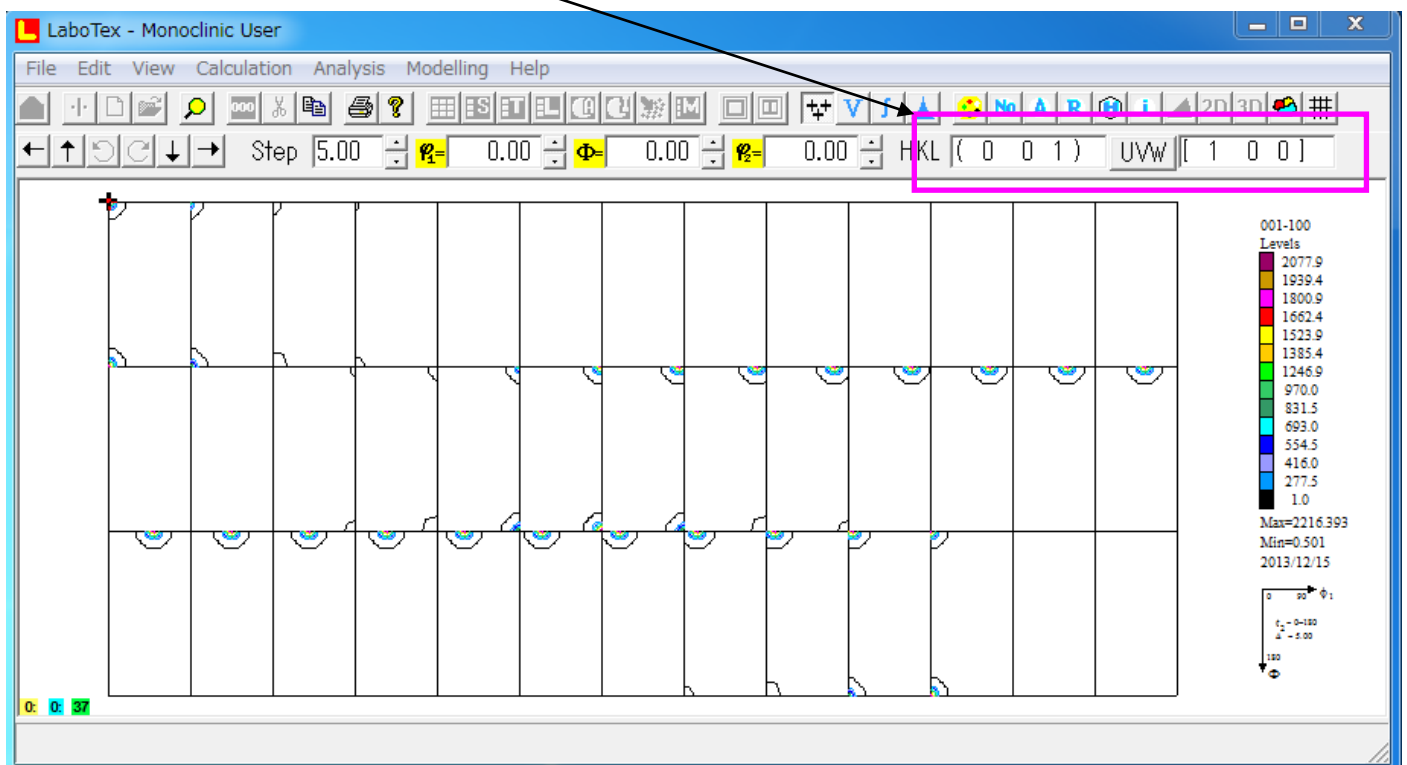


2 5 度から 4 5 度のデータを用いて測定されていない領域を外挿して配向評価を行う。

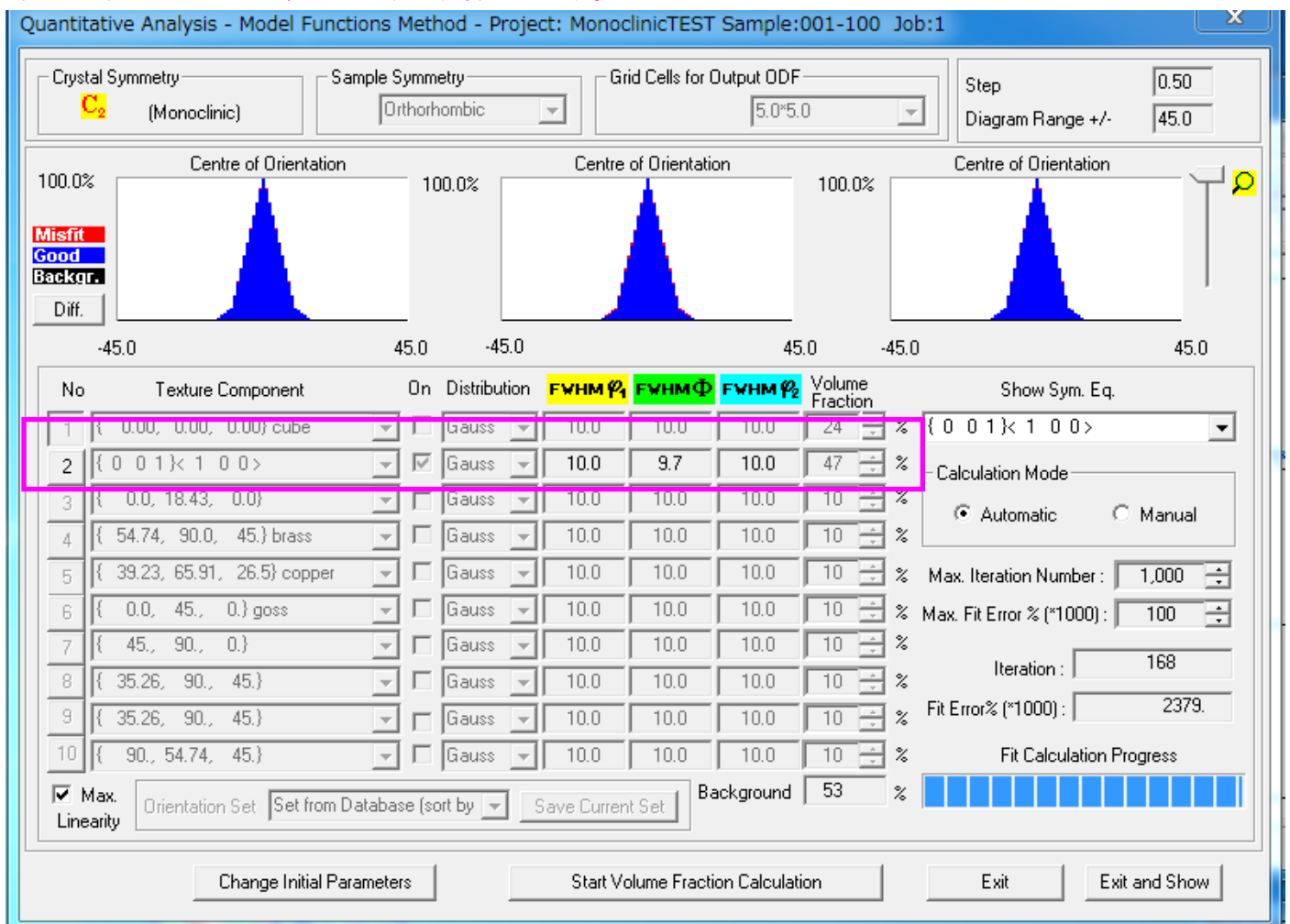


ODF 解析により結晶方位の定量が可能になります。(LaboTex)

結晶方位が決定されます。

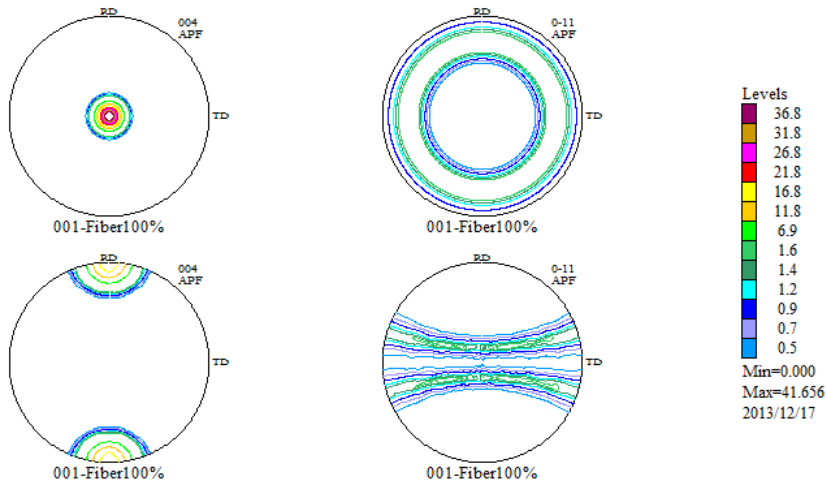


{0 0 1} <1 0 0>方位が47%と計算されます。

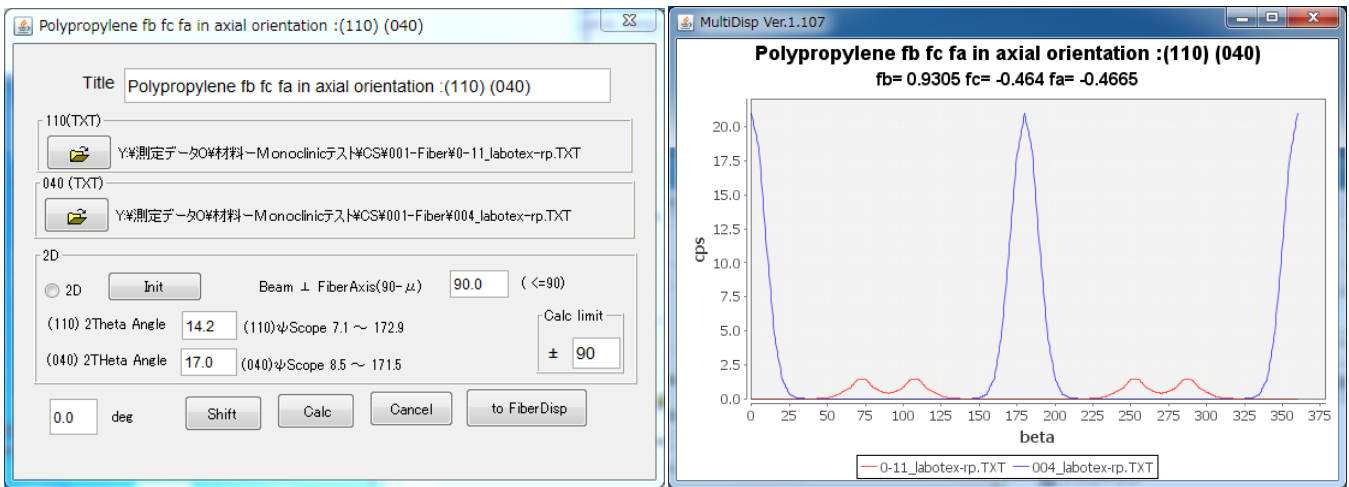


1 軸配向データの解析

1 軸配向の材料をND方向から測定した極点図（上段）に対し、TD方向から測定した極点図(下段)極点図は、CSの指数で表示しています。



下段の{0-11}極点図のα断面は、金太郎飴のように同じプロファイルを描いています。
 このような極点図の場合、極点図の外周プロファイルだけで、配向関数計算が可能になります。
 繊維試料台で測定したデータで、完全極点図から計算した配向関数結果と同じになります。
 極点で測定した極点図{004}、{0-11}の外周のみで計算してみます。(BSでは{040},{110}である)
 CS {004},{0-11}はBSで{040},{110}である。



基準方向Zに対し、b軸が平行で、a軸、c軸が垂直に近い事が分かります。

