

高分子シリーズ-ODF

P o l y p r o p y l e n e

ODF 解析で、材料の結晶方位の定量が可能になります。

2015年01月21日

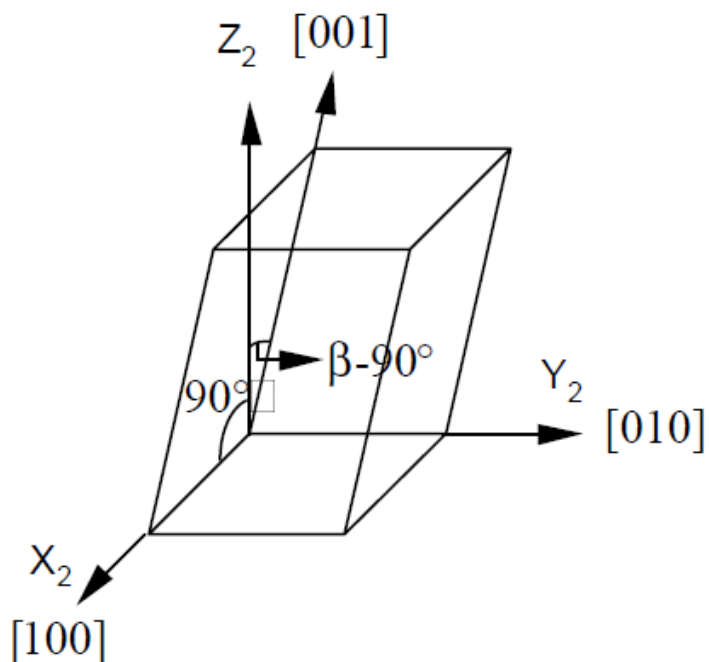
*HelperTex Office*

山田 義行

[OdfTex@ybb.ne.jp](mailto:OdfTex@ybb.ne.jp)

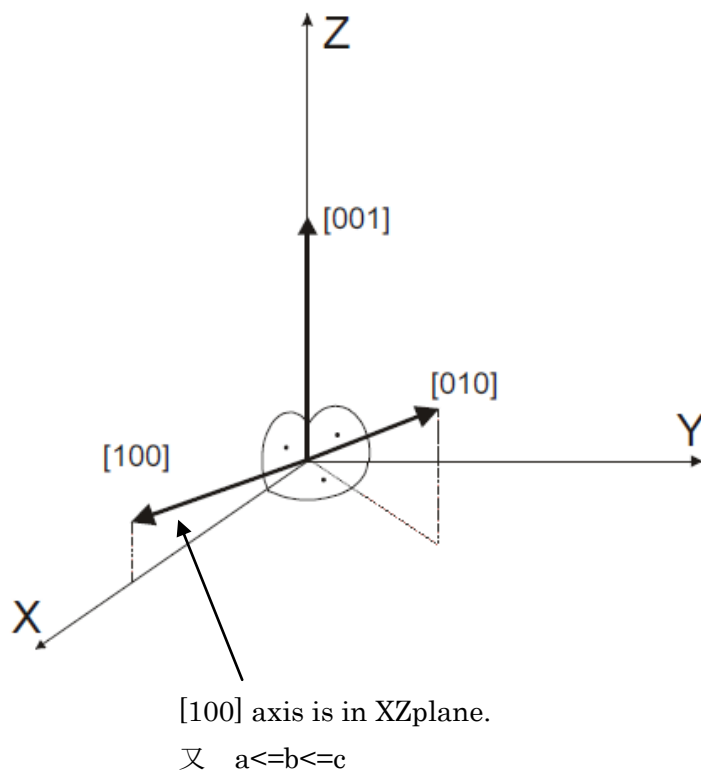
## 概要

高分子材料を延伸すると、材料表面が結晶面が揃う傾向があります。  
この解析に、極点からODF解析し、結晶方位の決定と結晶方位の%を求める事が可能になります。  
ODFではMonoclinicを2種類の方法で表現されています。  
TexToolsの表現方法 (TexTools-Tutorial より)



b)  $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

Labotexの表現方法 (Labotex-introduction より)



CTRソフトウェアのMaterialData ソフトウェアで

TexToolsでPolypropyleneを表現

$\alpha$ -PolypropyleneDISP

Monoclinic

6.63 (1.0)

20.78 (3.1342)

6.5 (0.9804)

90.0

99.5

90.0

1.54056

145

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

LaboTexでPolypropyleneを表現

$\beta$ -PolypropyleneDISP

Monoclinic

6.5 (1.0)

6.63 (1.02)

20.78 (3.1969)

90.0

90.0

80.5

1.54056

145

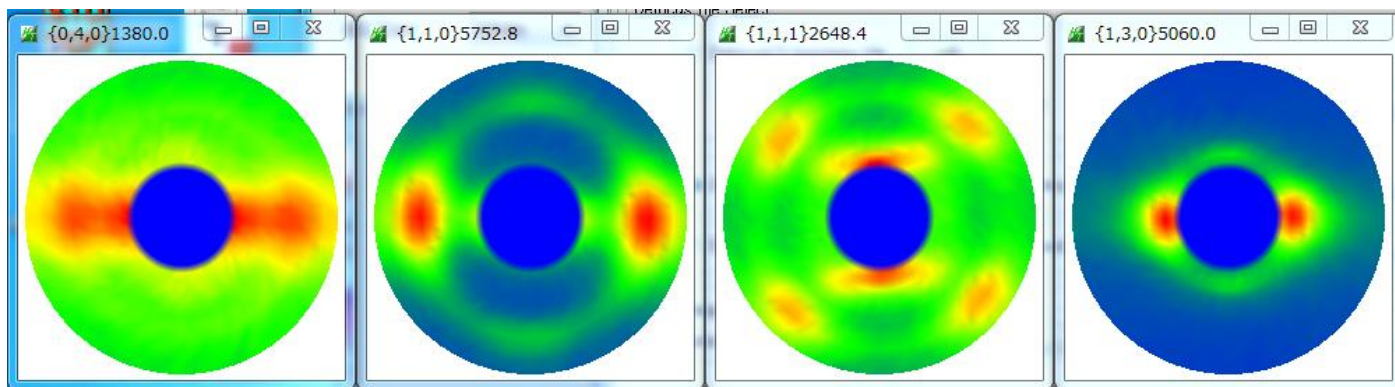
0	0	2	2.6	10.39	8.503
0	-1	0	1.2	6.5391	13.53
0	-1	1	100.0	6.2375	14.187
0	0	4	54.0	5.195	17.054
0	-1	3	71.4	4.7549	18.645
1	1	2	2.3	4.5126	19.656
1	-1	1	36.9	4.1556	21.364
1	1	3	70.4	4.0593	21.877
1	-1	2	1.8	3.9267	22.626
1	-1	3	3.7	3.617	24.592

軸変更により、格子定数の表現と各指数が変わります。

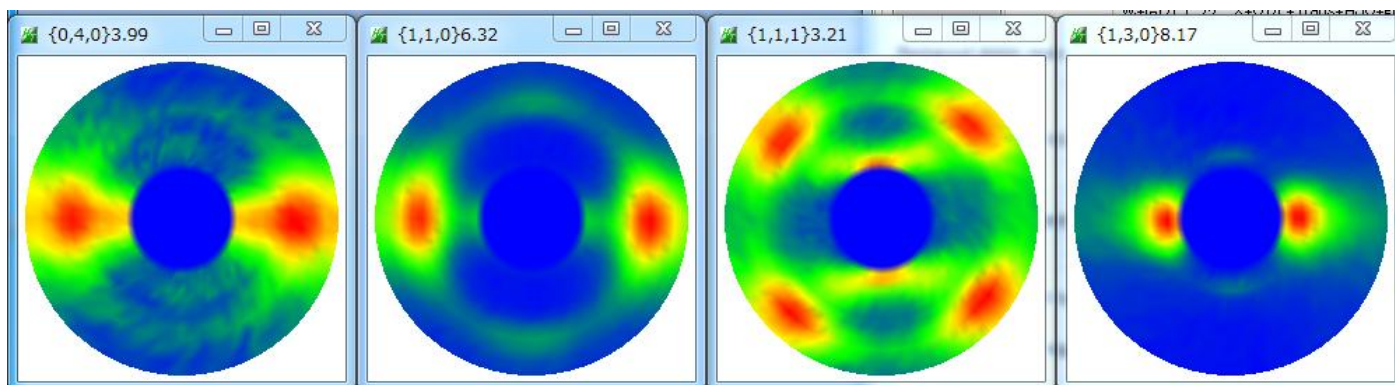
ODF解析時、ODF入力指数変更を行います。

CTRソフトウェアのPFtoODF3 ソフトウェアで自動的に変更されます。

駅弁のご飯の上に被せられているポリプロピレンの極点図  
測定データ



(B G, 吸収補正(ut=0.016)済)



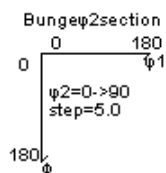
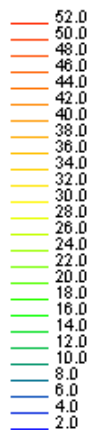
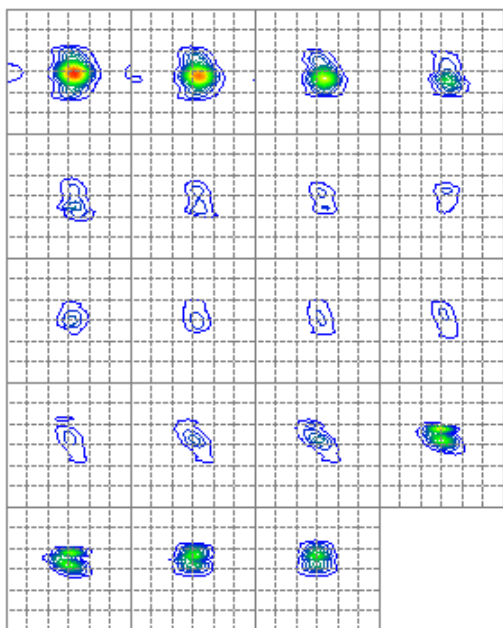
高分子材料は、極点処理に関して吸収補正のみで対応出来る透過法が有利である。

1 軸配向ではないので、配向度(Preferred Orientation)では解析出来ません。

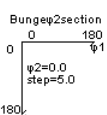
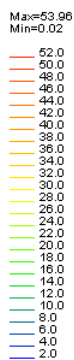
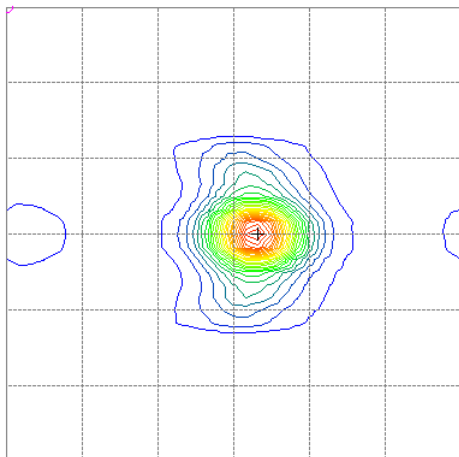
TexToolsとLaboTex解析を比較

TexTools の解析結果を GPODFDisplay で表示

filename: W:\高分子シリーズ\ODF\Trans\ASC\group\TexTools\PP.I Max=53.96  
Min=0.02



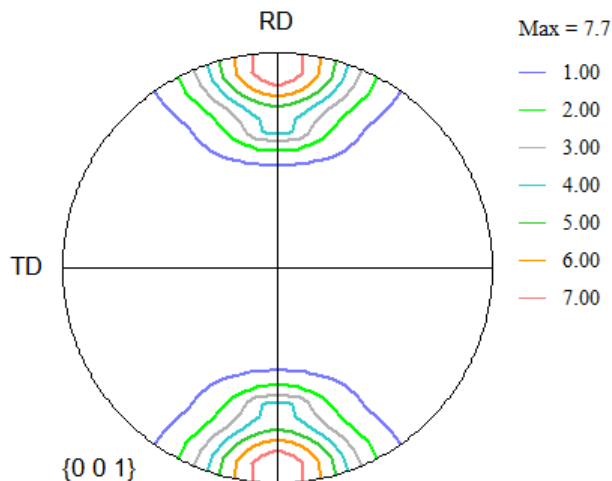
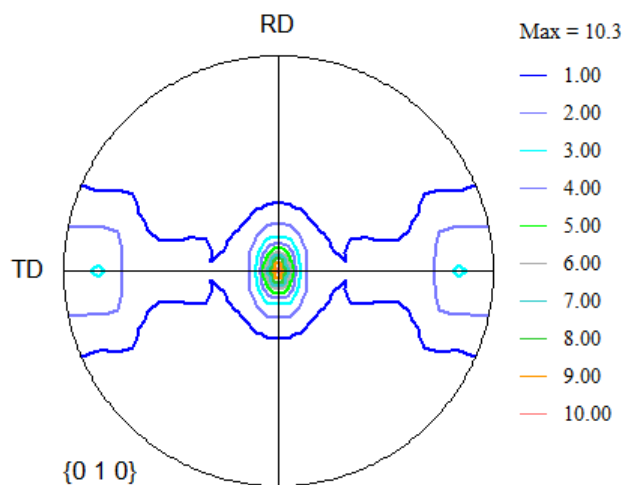
filename: W:\高分子シリーズ\ODF\Trans\ASC\group\TexTools\PP.HODF Max=53.96  
Min=0.02



$\phi 1=99.5 \Phi=90.5 \phi 2=0.0 \text{ ODF}=54.0$

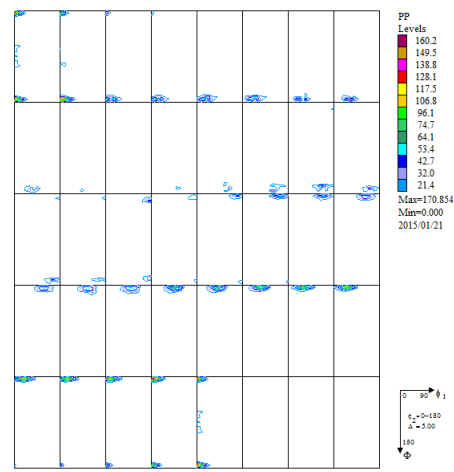
$\phi 1=99.5, \Phi=0, \phi 2=0$   
{010}<001>である事が分かります。  
よって、  
{01}, {001}極点図は

$\phi 1=99.5 \Phi=90.5 \phi 2=0.0 \text{ ODF}=54.0$

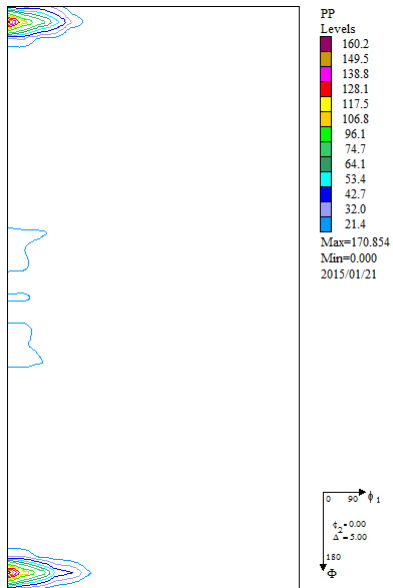


若干 RD 方向に広がっている

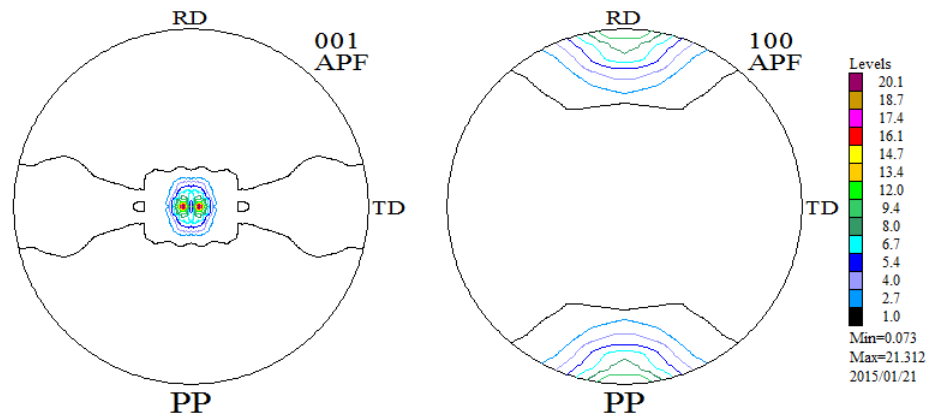
La b o T e x で解析



Euler 角度(0,0,0)が{001}<100>であるが  
 最大指数 15 で整数化行くと  
 (0,5.25,0)も(001)<100>になってしまう。  
 (0,11.96,0)はは{0 1 15}<100>



極点図は



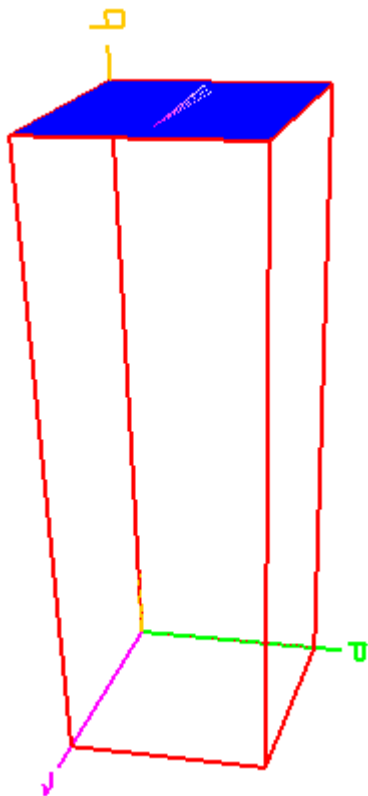
若干,TD 方向に広がっている

結晶方位定量 (Volume Fraction) は {001} <100>が24%と計算されます。

結晶方位図 (OrientationDisplayソフトウェア使用)

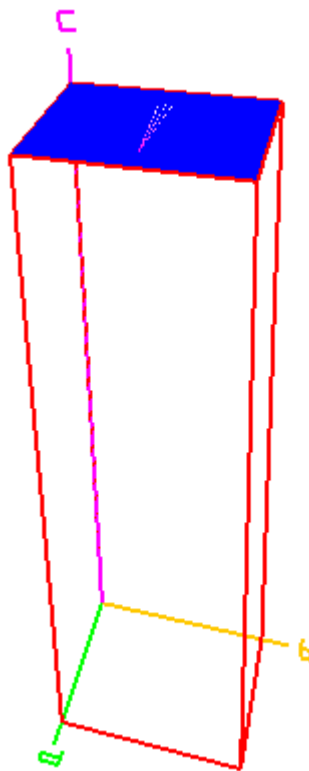
TexTools

α-Polypropylene  
Monoclinic : 1.0 x 3.1342 x 0.9804 x 90.0 x 99.5 x 90.0  
Miller Indices  
(hkl)[uvw] 0 1 0 0 0 1



LaboTex

α-Polypropylene  
Monoclinic : 1.0 x 1.02 x 3.1969 x 90.0 x 90.0 x 80.5  
Miller Indices  
(hkl)[uvw] 0 0 1 1 0 0



最長軸が、材料表面と垂直になっている。  
結晶方位が24%存在している事が計算されます。