

α -Polypropylene の結晶方位の問い合わせに関して

測定データ¥材料-PP¥pp-check¥PP-CHECK

ICDDカード情報では、00-050-2397 を参考にすると

Cell: 6.6300 20.7800 6.5000 90.000 99.500 90.000 である。

ODF解析から得られる情報は Euler 角度であり、Euler 角度から $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ を計算している。

計算から実数の結晶方位が計算されるが、実際の結晶方位は整数として表現されている。

ここに誤差が存在してきます。

更に、測定では通常 5 度間隔で測定しているが、この測定からも誤差は発生する。

Euler 角度を整数の結晶方位では表現できない場合があります。

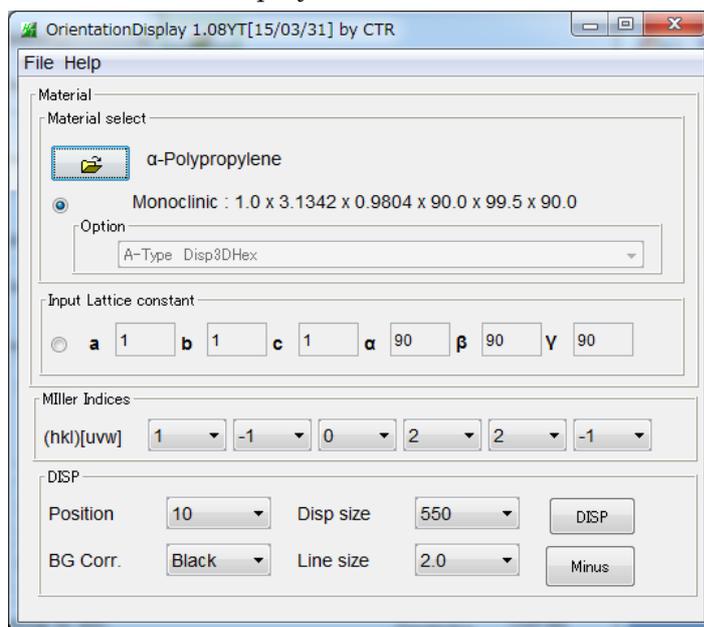
今回、Monoclinic の結晶を

Cell: 6.500 6.6300 20.7800 90.000 90.000 80.500 で計算した $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ を

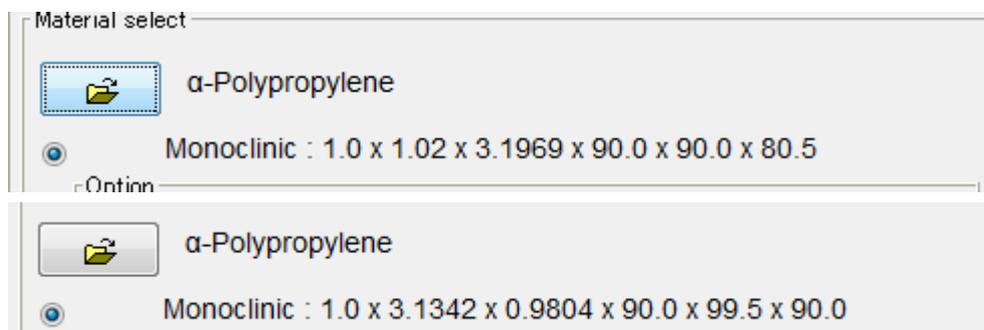
Cell: 6.6300 20.7800 6.5000 90.000 99.500 90.000 で表現する方法に関して問い合わせがあり

検討しました。

検討方法は、OrientationDisplay を用いる



本ソフトウェアは、格子定数を指定して $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ を表示する機能があります。



例えば(001)[0-10]

6.500 6.6300 20.7800 90.000 90.000 80.500

α-Polypropylene

Monoclinic : 1.0 x 1.02 x 3.1969 x 90.0 x 90.0 x 80.5

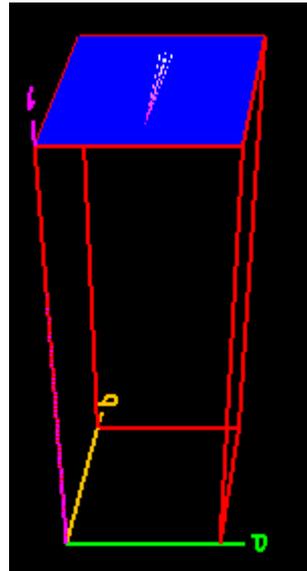
Option
A-Type Disp3DHex

Input Lattice constant

a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 γ 90

Miller Indices

(hkl)[uvw] 0 0 1 0 -1 0



6.6300 20.7800 6.5000 90.000 99.500 90.000

α-Polypropylene

Monoclinic : 1.0 x 3.1342 x 0.9804 x 90.0 x 99.5 x 90.0

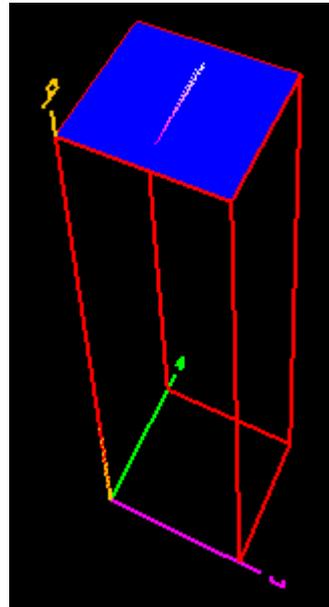
Option
A-Type Disp3DHex

Input Lattice constant

a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 γ 90

Miller Indices

(hkl)[uvw] 0 1 0 -1 0 0



例えば(001)[100]

6.500 6.6300 20.7800 90.000 90.000 80.500

Material select

α -Polypropylene

Monoclinic : 1.0 x 1.02 x 3.1969 x 90.0 x 90.0 x 80.5

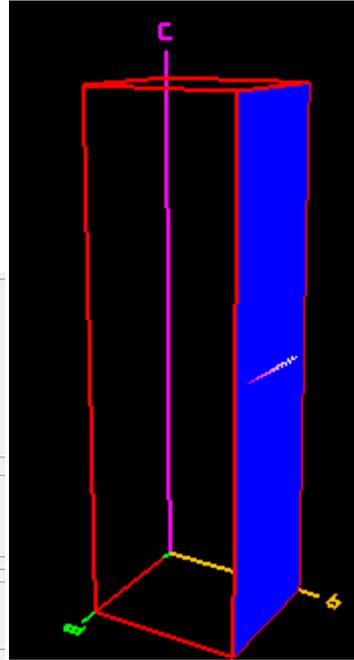
Option

Input Lattice constant

a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 γ 90

Miller Indices

(hkl)[uvw] 0 1 0 1 0 0



6.6300 20.7800 6.5000 90.000 99.500 90.000

Material select

α -Polypropylene

Monoclinic : 1.0 x 3.1342 x 0.9804 x 90.0 x 99.5 x 90.0

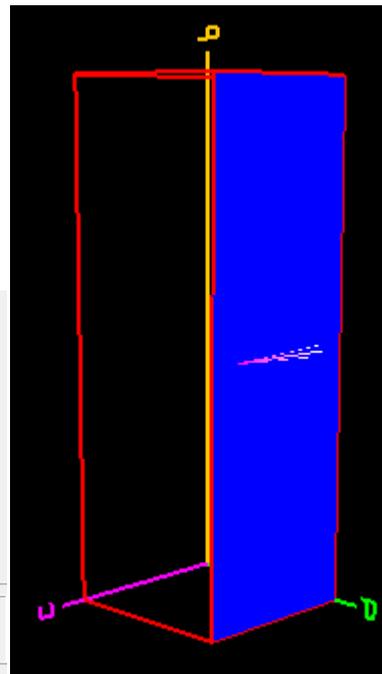
Option

Input Lattice constant

a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 γ 90

Miller Indices

(hkl)[uvw] 1 0 0 0 0 1



(0-11)[011]

6.500 6.6300 20.7800 90.000 90.000 80.500

Material select

α-Polypropylene

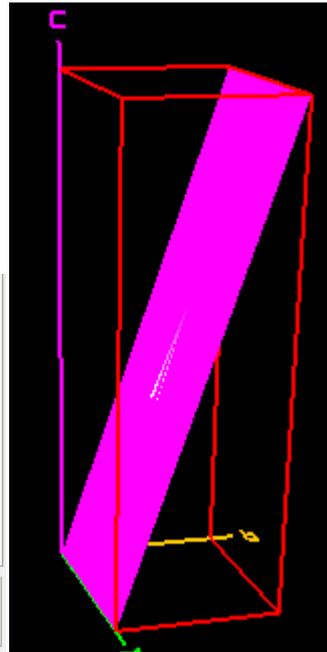
Monoclinic : 1.0 x 1.02 x 3.1969 x 90.0 x 90.0 x 80.5

Option
A-Type Disp3DHex

Input Lattice constant

a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 γ 90

Miller Indices
(hkl)[uvw] 0 -1 1 0 1 1



6.6300 20.7800 6.5000 90.000 99.500 90.000

Material select

α-Polypropylene

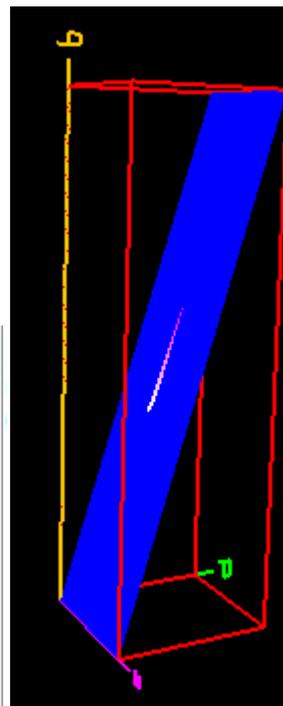
Monoclinic : 1.0 x 3.1342 x 0.9804 x 90.0 x 99.5 x 90.0

Option
A-Type Disp3DHex

Input Lattice constant

a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 γ 90

Miller Indices
(hkl)[uvw] 0 -1 1 0 1 1



(0-11)[0-1-1]

6.500 6.6300 20.7800 90.000 90.000 80.500

Material select

α-Polypropylene

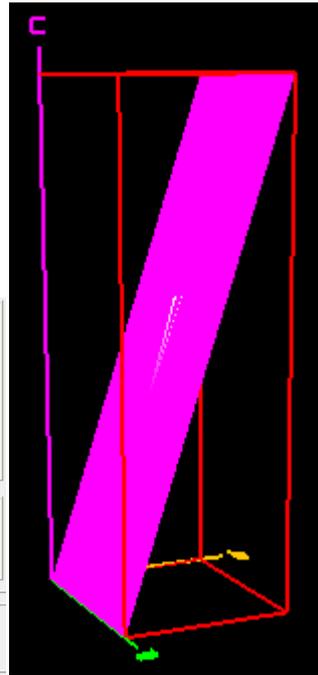
Monoclinic : 1.0 x 1.02 x 3.1969 x 90.0 x 90.0 x 80.5

Option
A-Type Disp3DHex

Input Lattice constant

a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 γ 90

Miller Indices
(hkl)[uvw] 0 -1 1 0 -1 1



6.6300 20.7800 6.5000 90.000 99.500 90.000

α-Polypropylene

Monoclinic : 1.0 x 3.1342 x 0.9804 x 90.0 x 99.5 x 90.0

Option
A-Type Disp3DHex

Input Lattice constant

a 1 b 1 c 1 α 90 β 90 γ 90

Miller Indices
(hkl)[uvw] 1 -1 0 -1 -1 0

