

## ポリエチレン試料解析をLaboTexとTexToolsで比較する

高分子材料のODF解析では、LaboTexよりTexToolsが有利であることを説明します。

LaboTexでは、軸配向極点図のVolumeFraction（定量）は直接計算出来ません。  
更に、高分子材料の逆極点計算が不可解の点があります。  
しかし、結晶方位からODF図のmodeling機能があります。

TexToolsでは、面配向、軸配向のVolumeFraction計算が可能  
Triclinicを除く結晶系の逆極点計算が可能  
Modeling機能はありません。

このような理由で、高分子材料ではTexToolsをお勧め致します。

2016年10月18日



*HelperTex Office*

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

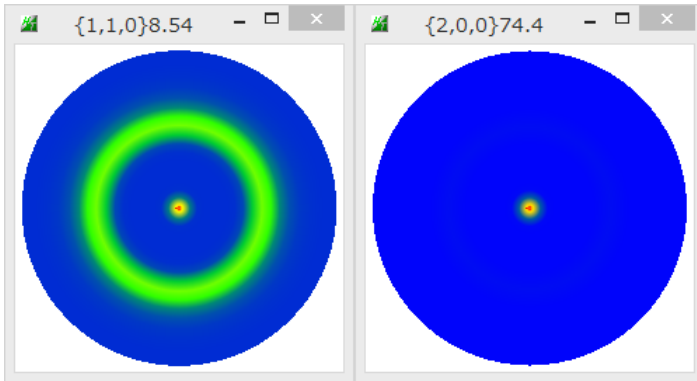
## 目次

1. 概要
2. 入力データ
3. ODF 用ファイル作成
  3. 1 LaboTex に格子定数変換
  3. 2 TexTools 用格子定数
4. LaboTex で入力データの解析
  4. 1 VolumeFraction
  4. 2 再計算極点図
  4. 3 LaboTex の逆極点図は不可解
  4. 4 Kreans Factor
5. TexTools で入力データの解析
  5. 1 VolumeFraction
  5. 2 逆極点図
  5. 3 再計算極点図{200}から Kreans Factor を計算
6. TD軸で90度回転した極点図を TexTools で解析
  6. 1 VolumeFraction
  6. 2 逆極点図 RD 方向
  6. 3 Kreans Factor
7. TD 軸回転の RD 方向逆極点図
8. TD 回転前の逆極点 ND 方向
9.  $\{1\ 2\ 5\}$  と  $\{4\ 3\ 1\}$  面が存在する場合の Direction と Plane

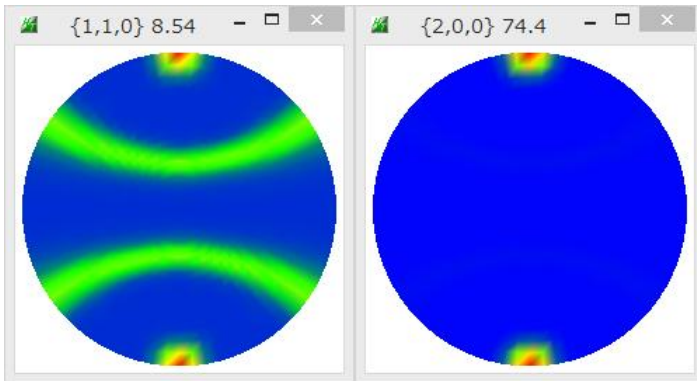
## 1. 概要

透過極点図と反射極点図の極点図接続を行った完全極点図のODF解析比較を行う。

## 2. 入力データ



T D軸で90度回転



LaboTex では、軸配向極点図を直接 VolumeFraction 計算できません。

## 3. ODF 用ファイル作成

### 3. 1 LaboTex に格子定数変換

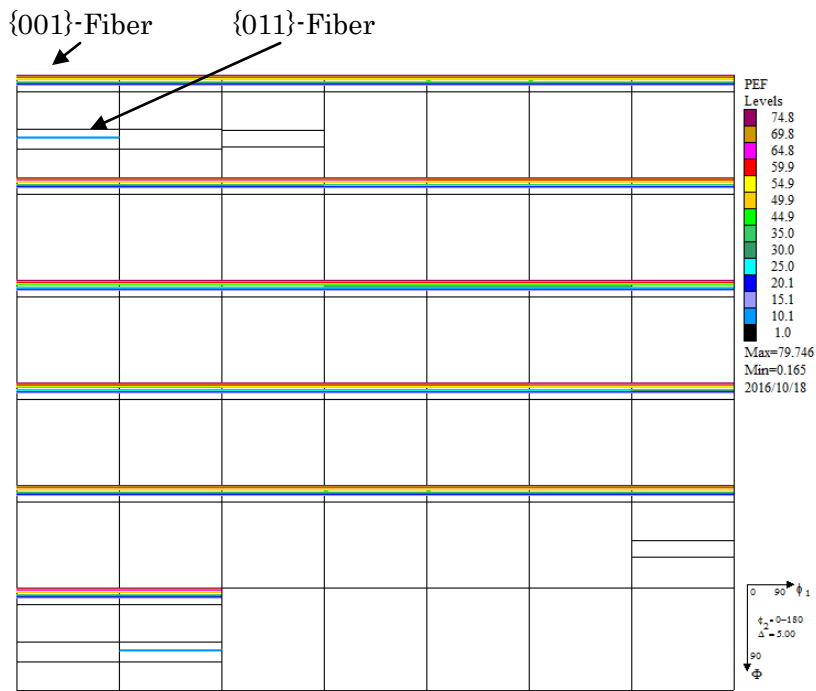
Lattice constant		Initialize									
Material	Polyethylene.txt	Start									
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)		3 - D2 (orthorhombic)									
a	1.0	<=b	1.9409	<=c	2.9134	alfa	90.0	beta	90.0	gamm	90.0
PF Data											
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select					
110_2.TXT	0,1,1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>					
200_2.TXT	0,0,2	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>					

LaboTex では直交座標 Z 軸と結晶軸 C 軸を一致させ、a 軸-c 軸を基準面としています。  
更に  $a < b$ ,  $c$  として変換されています。

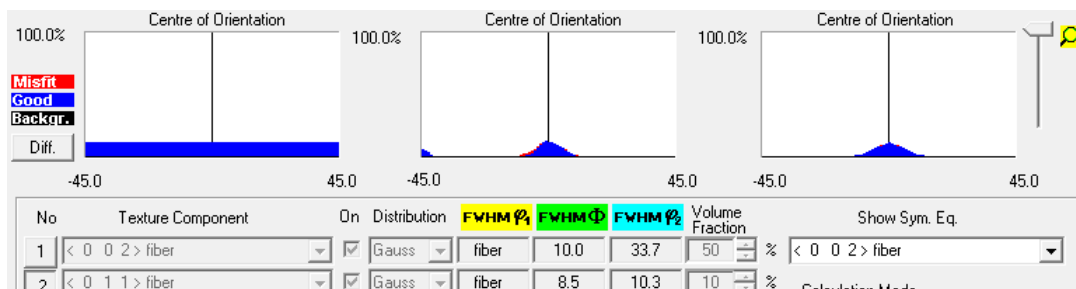
### 3. 2 TexTools 用格子定数

Lattice constant		Initialize									
Material	Polyethylene.txt	Start									
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)		3 - D2 (orthorhombic)									
a	1.0	<=b	0.6662	<=c	0.3432	alfa	90.0	beta	90.0	gamm	90.0
PF Data											
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select					
110_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>					
200_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>					

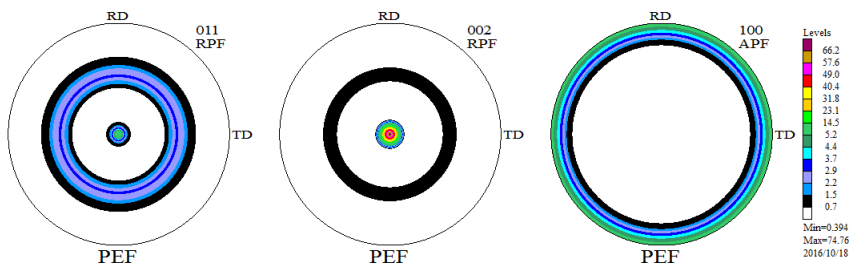
#### 4. LaboTex で入力データの解析



#### 4. 1 VolumeFraction {002}-Fiber $\perp$ ND が 50%、{011}-Fiber $\perp$ ND が 10%



#### 4. 2 再計算極点図

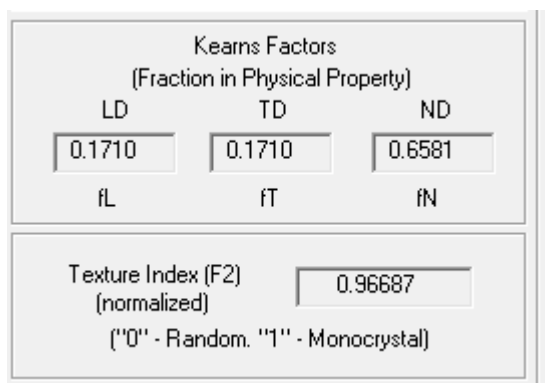


#### 4. 3 LaboTex の逆極点図は不可解

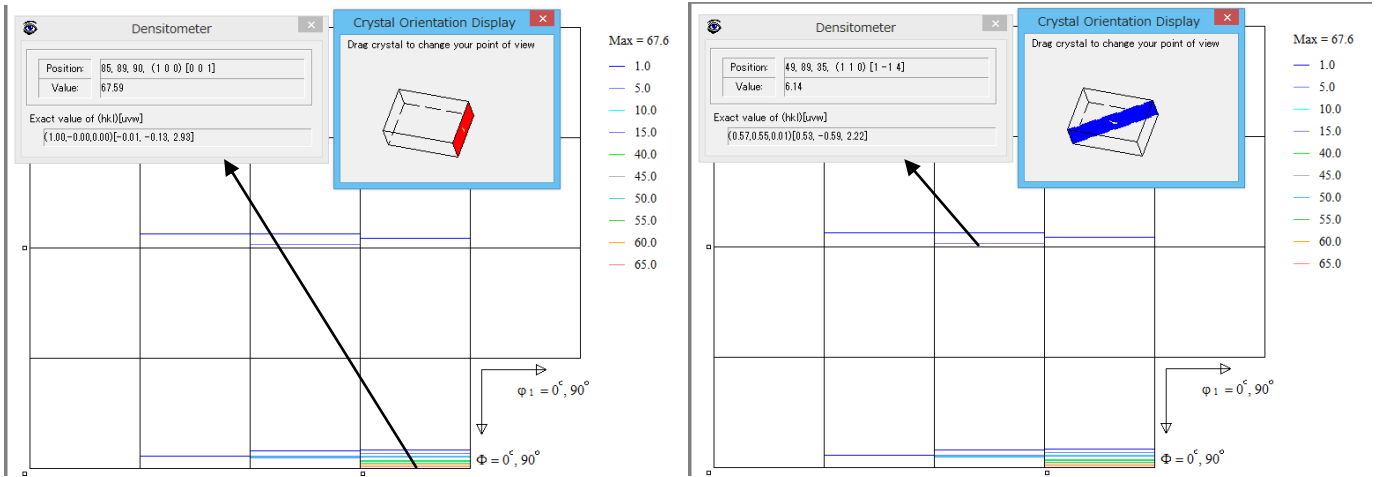
解析を行いません。

#### 4. 4 Kreans Factor

{002}の配向関数が計算されています。CTR では Orientation ソフトウェアと同一です。

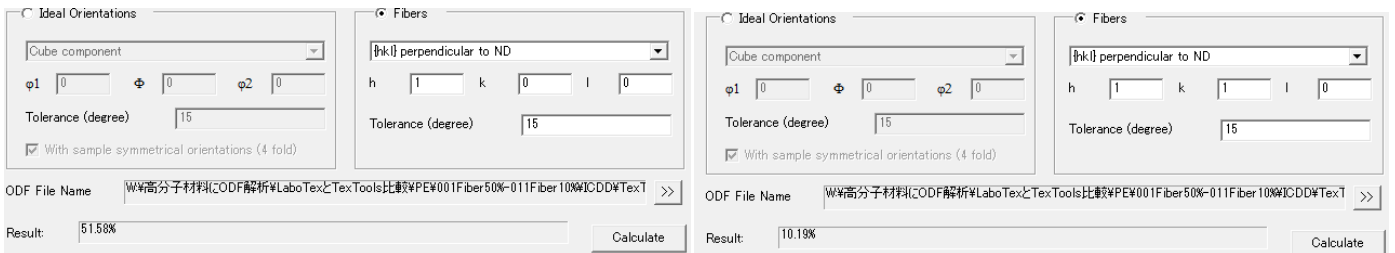


## 5. TexTools で入力データの解析

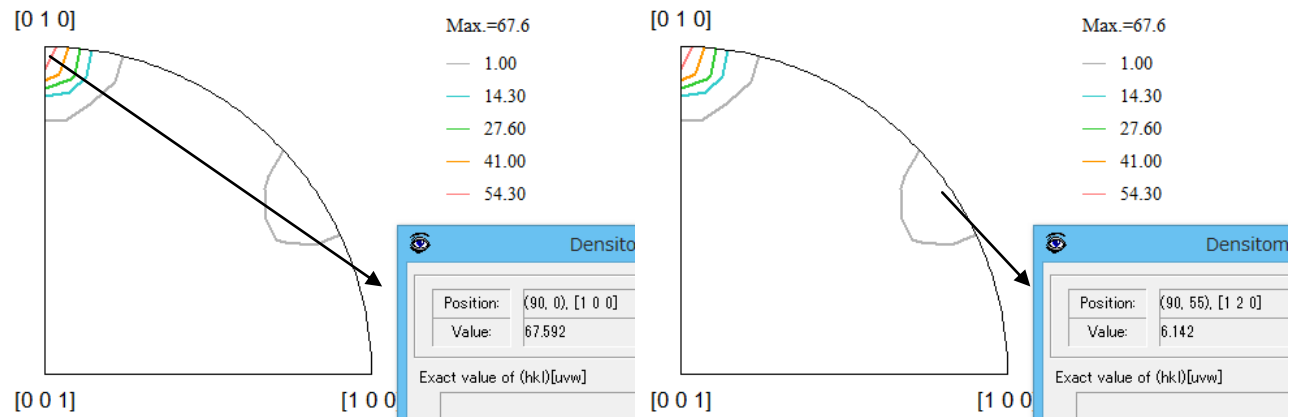


5. 1 VolumeFraction  $\{200\}$ -Fiber/ $\perp$ ND 51.58%

$\{110\}$ -Fiber/ $\perp$ ND 10.19%



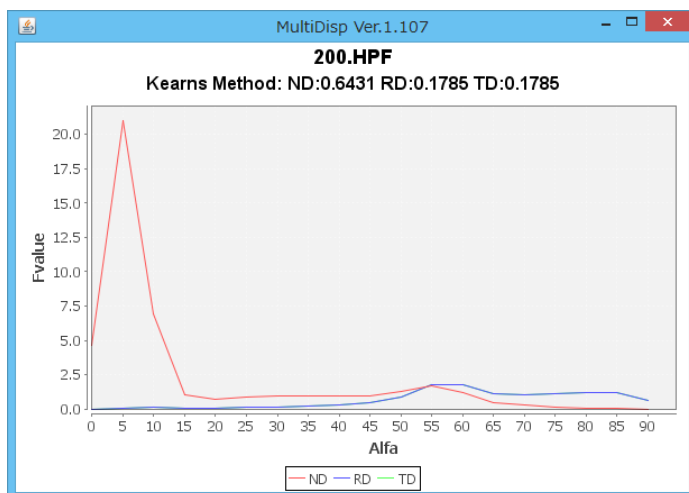
## 5. 2 逆極点図



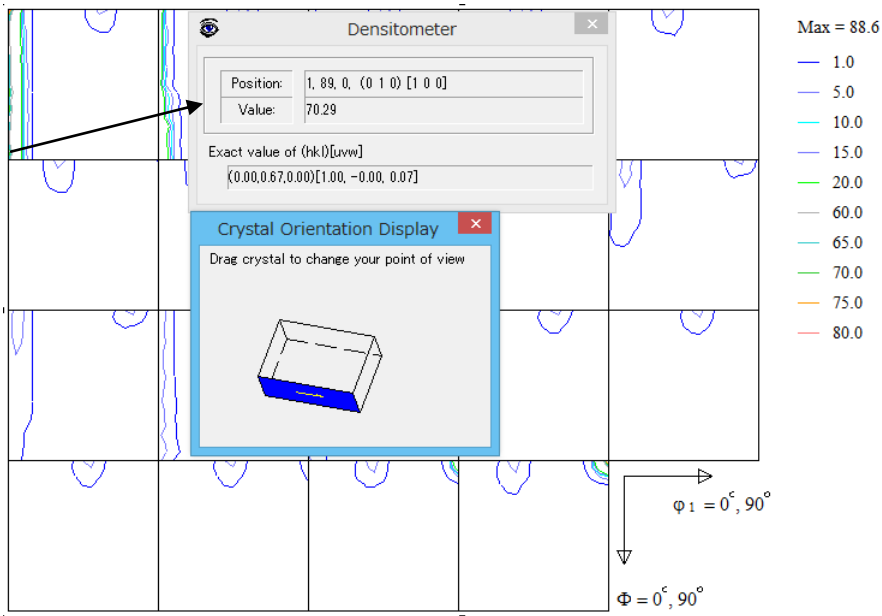
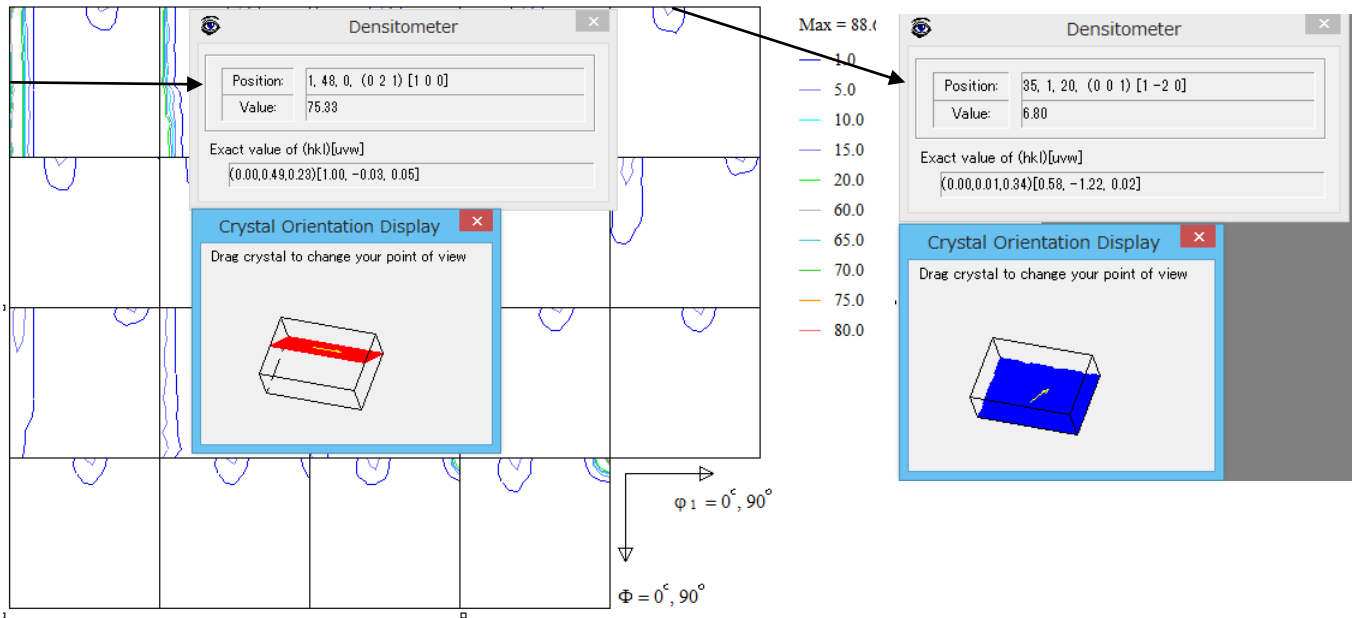
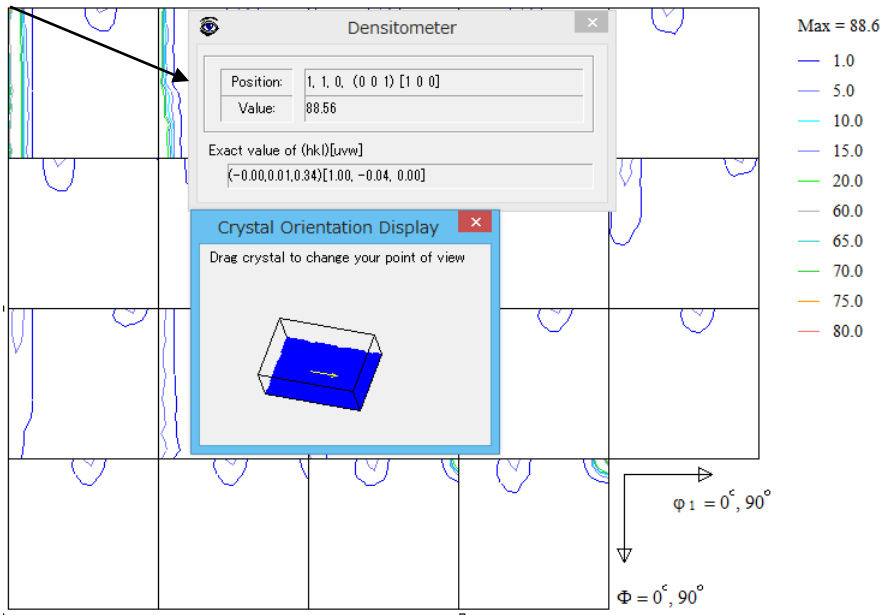
TexTools 軸  $[001]$ - $[100]$ - $[010]$ は $[001]$ - $[010]$ - $[100]$ かな???

## 5. 3 再計算極点図 $\{200\}$ から Kears Factor を計算 (CTR の Orientastion ソフトウェアで計算)

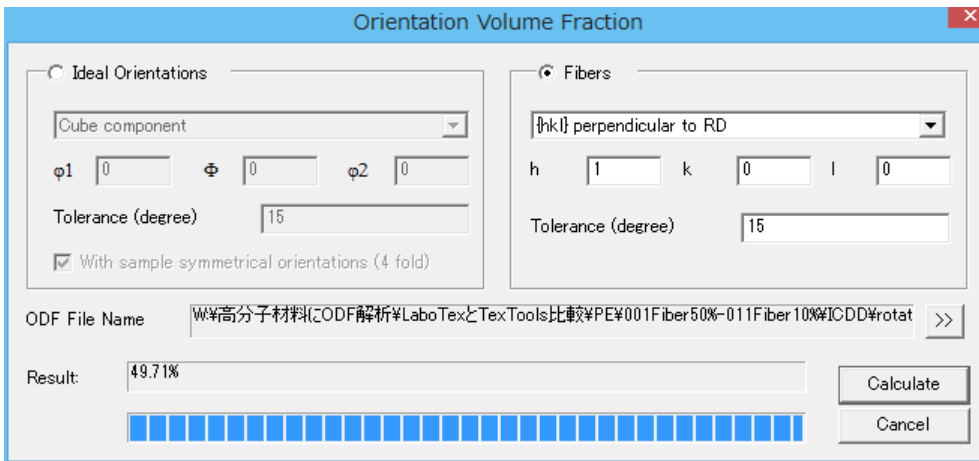
TexTools ソフトウェアでは Kears Factor の計算はできないが極点図を Export すれば CTR ソフトウェアにより計算できます。



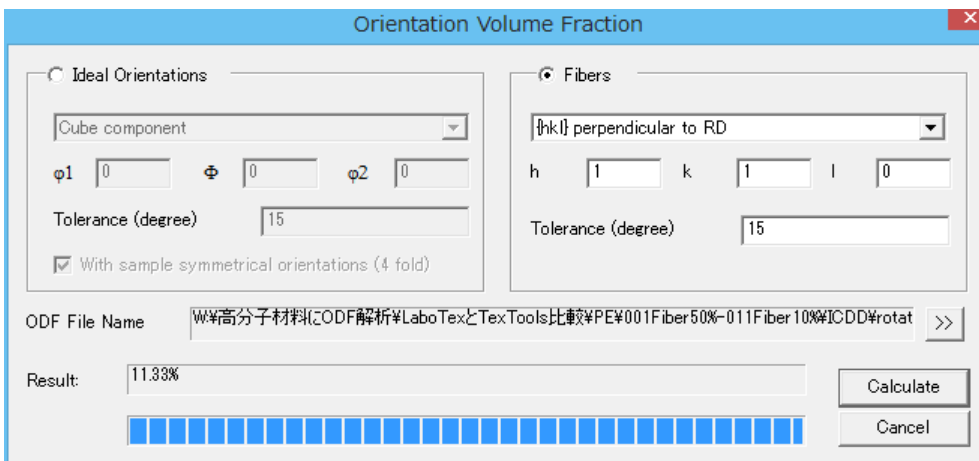
6. TD軸で90度回転した極点図を TexTools で解析



## 6. 1 VolumeFraction



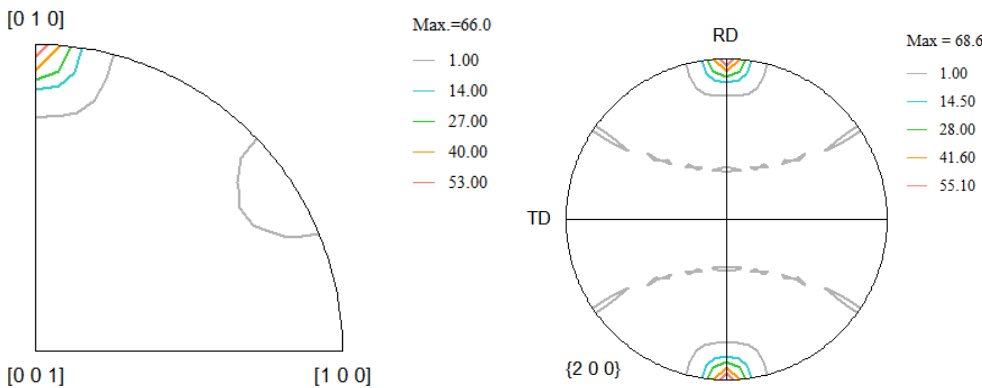
<100>-Fiber//RD



<110>-Fiber//RD

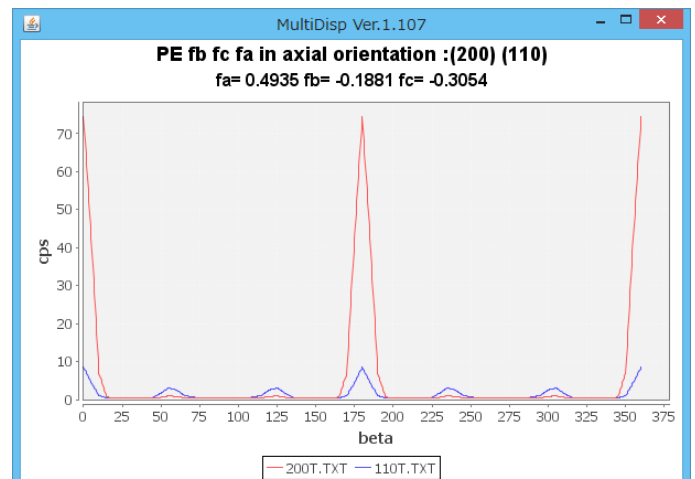
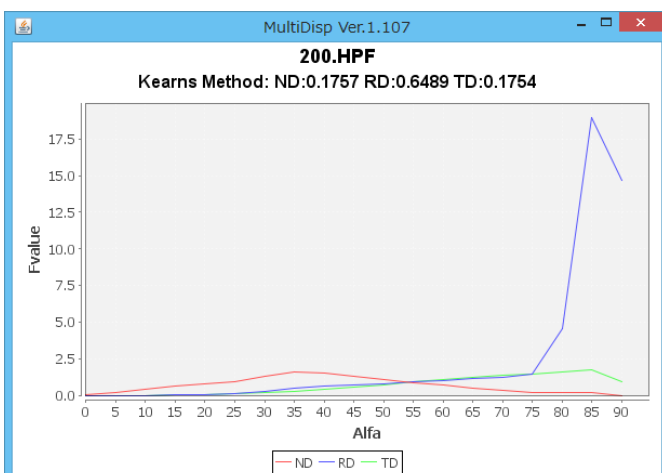
## 6. 2 逆極点図 RD 方向

{200} 極点図

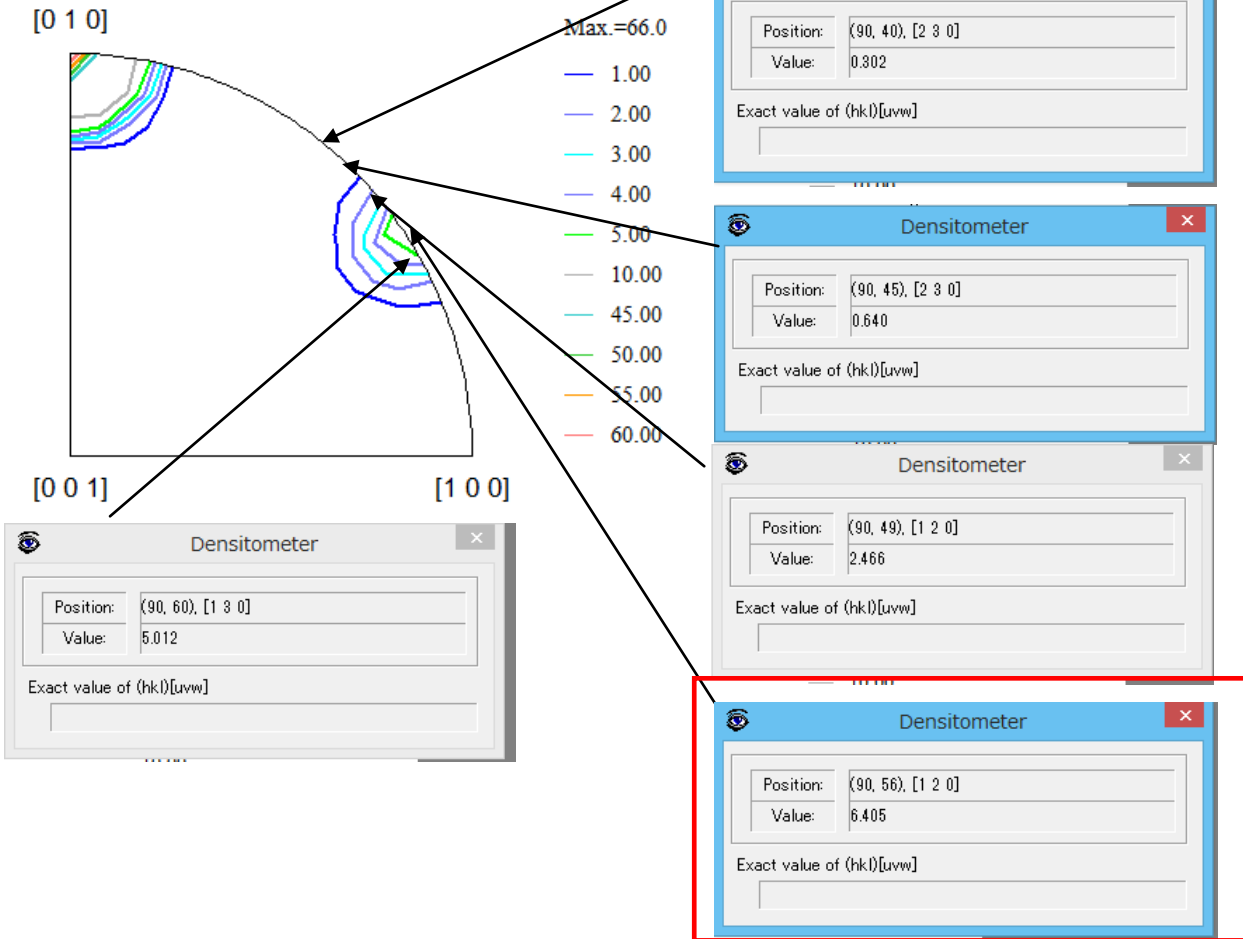


## 6. 3 Kreans Factor

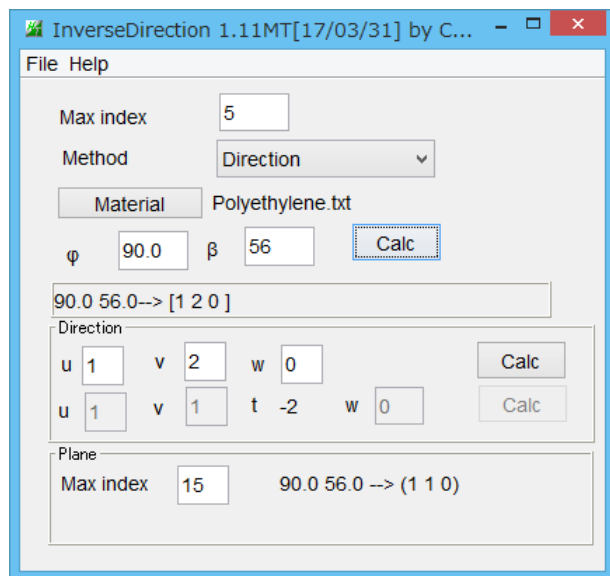
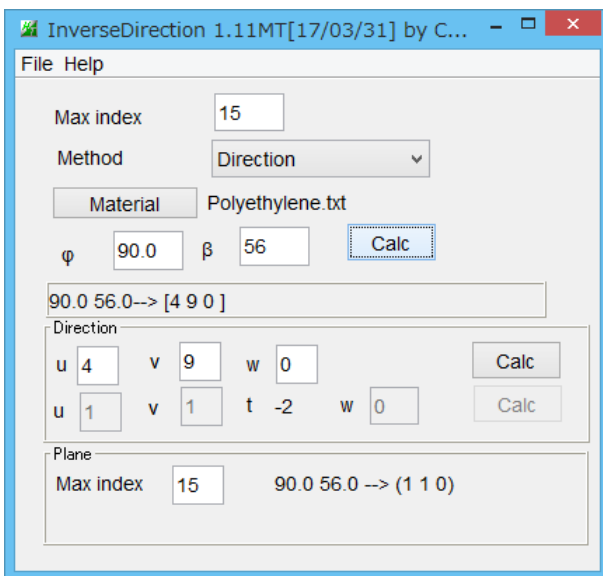
測定透過極点図の外周のみから配向分布関数計算



7. TD 軸回転の RD 方向逆極点図(Direction)



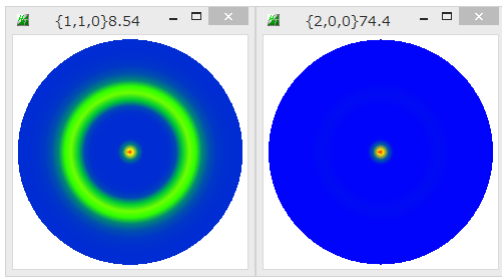
逆極点( $\alpha$ 、 $\beta$ )角度(90,56)を TexTools で計算すると[120]であるが  
 計算する MaxIndex を 15 で計算すると[490]である。  
 Direction から Plane に変換すると[490]->(110)である  
 MaxIndex を 5 で計算すると、[120]になります。



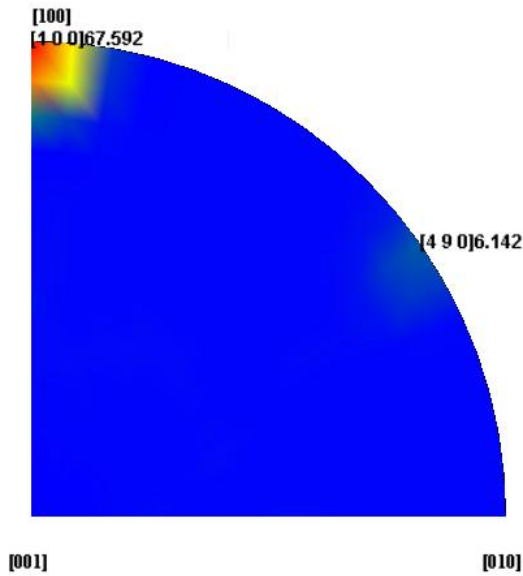
このような事を理解した上で、TD 回転前の逆極点 ND と TD 回転後の逆極点を精密に解析してみると



8. TD回転前の逆極点ND方向 (TexTools では Direction で計算される)



Method: Direction | Miller Notation(3 Axis Notation) | Plane max index:  | Direction max index:

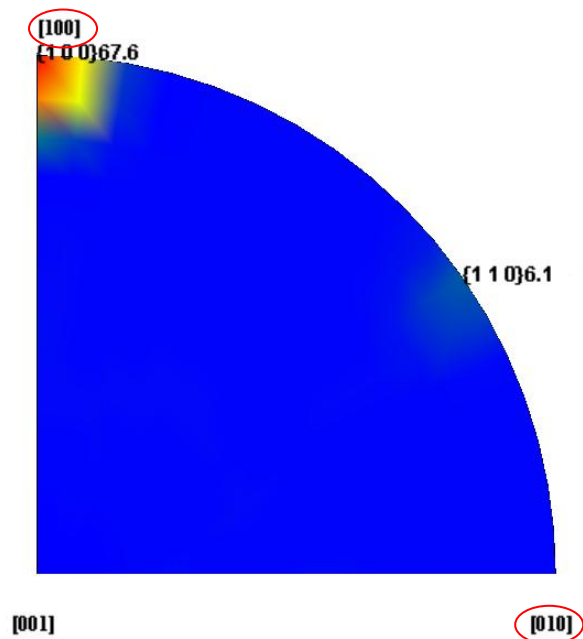


[4 9 0]	90.0	55.0	6.142	90.0	35.0
[1 0 0]	90.0	0.0	67.592	90.0	90.0

TexTools で[120]で計算される方位が [490]と計算される

ND.HIPF\_Max=67.6

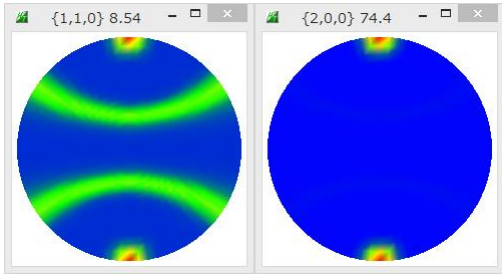
Method: Plane | Miller Notation(3 Axis Notation) | Plane max index:  | Direction max index:



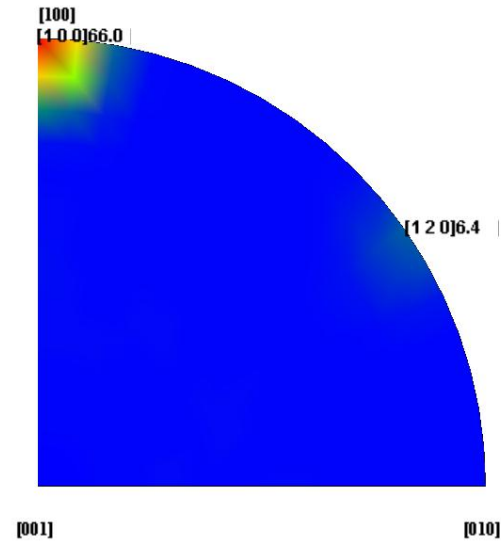
[1 1 0]	90.0	55.0	6.142	90.0	35.0
[1 0 0]	90.0	0.0	67.592	90.0	90.0

ND.HIPF\_Max=67.6

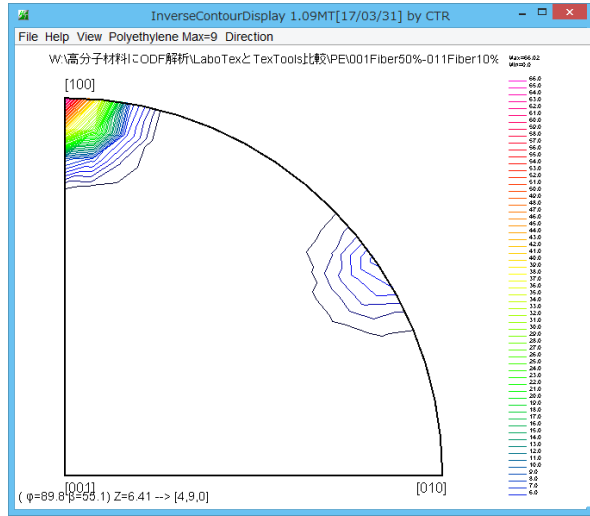
9. TD 軸で回転された逆極点図 RD 方向



Method:  Miller Notation(3 Axis Notation)  Plane max index:  Direction max index:

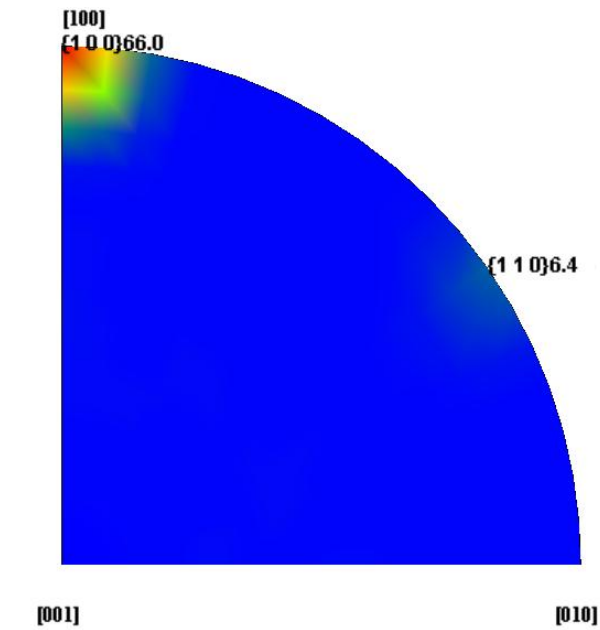


[4 9 0]	90.0	55.0	6.405	90.0	35.0
[1 0 0]	90.0	0.0	66.023	90.0	90.0

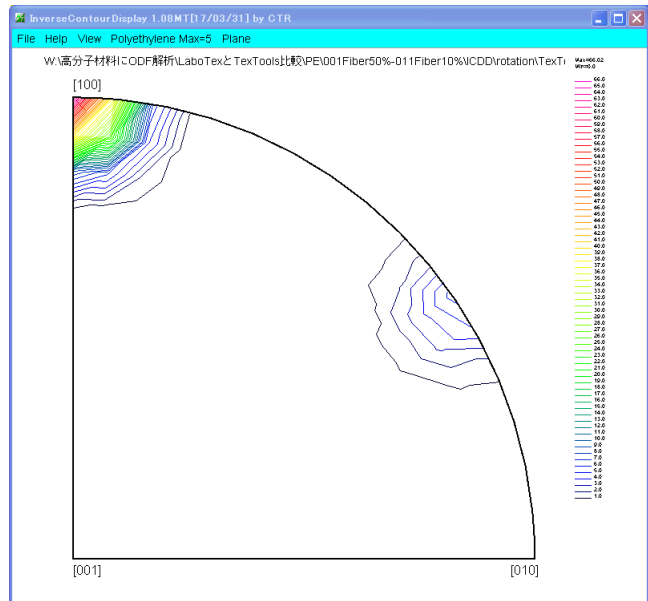


RD.HIPF\_Max=66.0

Method:  Miller Notation(3 Axis Notation)  Plane max index:  Direction max index:

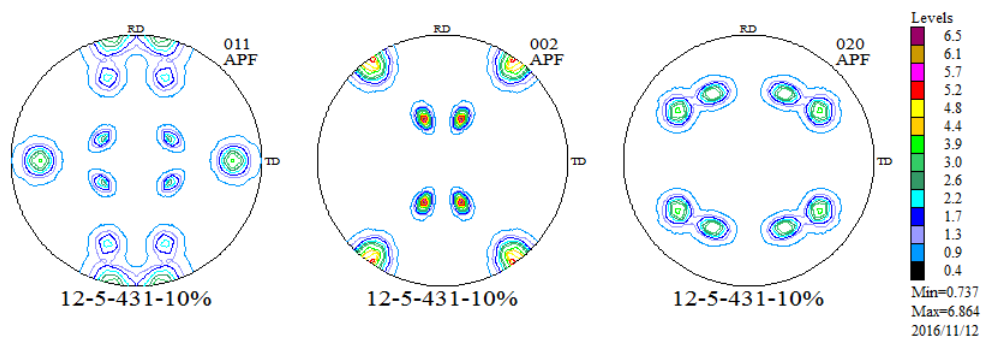
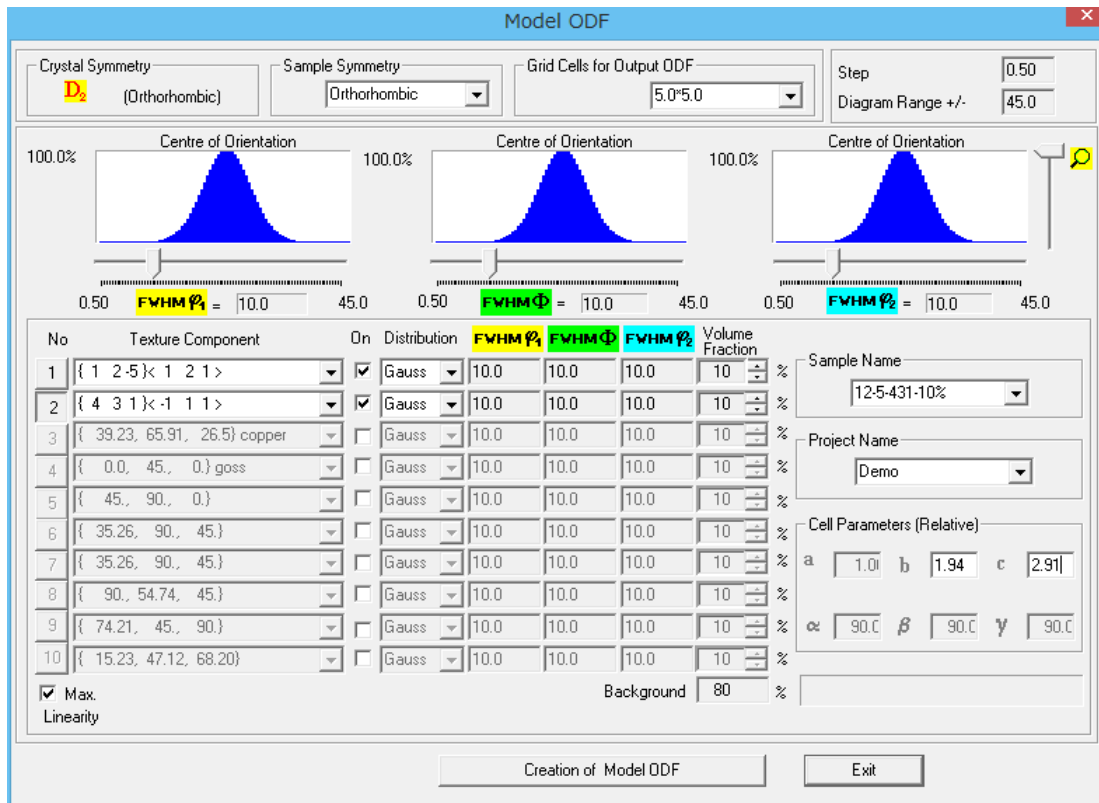


[1 1 0]	90.0	55.0	6.4	90.0	35.0
[1 0 0]	90.0	0.0	66.0	90.0	90.0



RD.HIPF\_Max=66.0

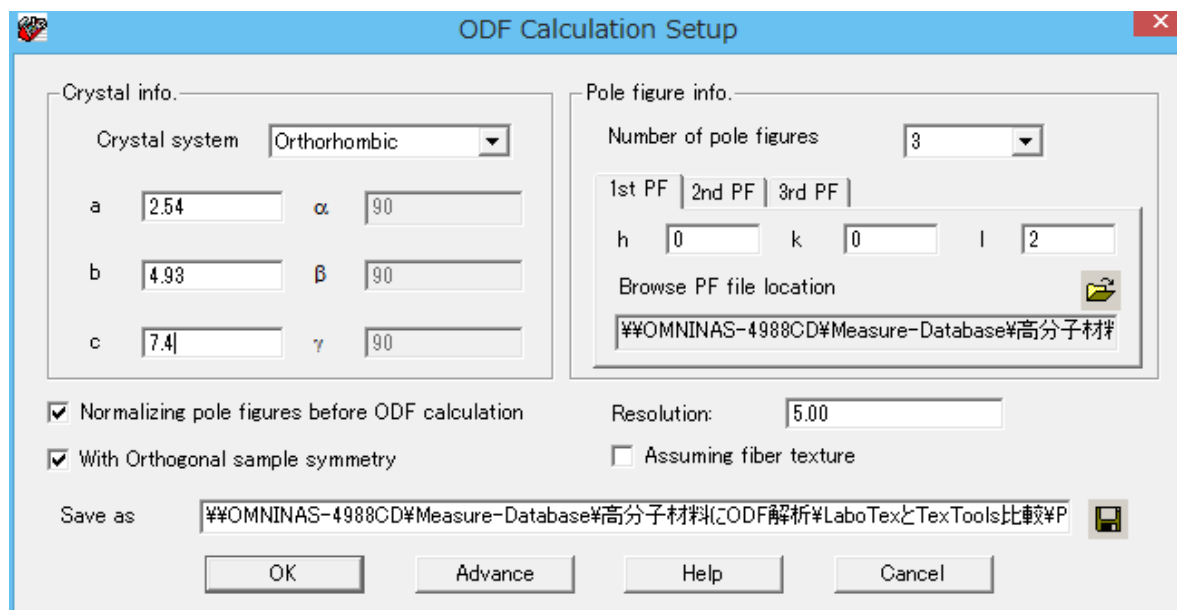
9.  $\{125\}$  と  $\{431\}$  面が存在する場合の *Direction* と *Plane*  
 LaboTex で  $\{12-5\} \langle 121 \rangle$  と  $\{431\} \langle -111 \rangle$  の ODF を作成し  
 極点図  $\{011\}$ 、 $\{002\}$ 、 $\{020\}$  を作成、



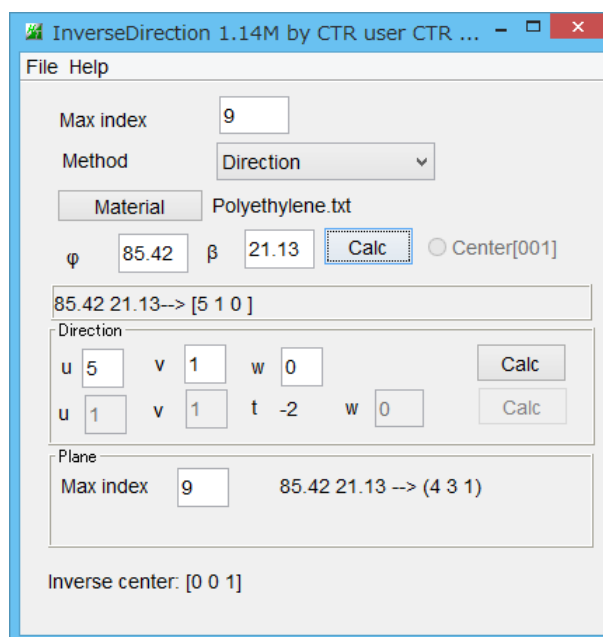
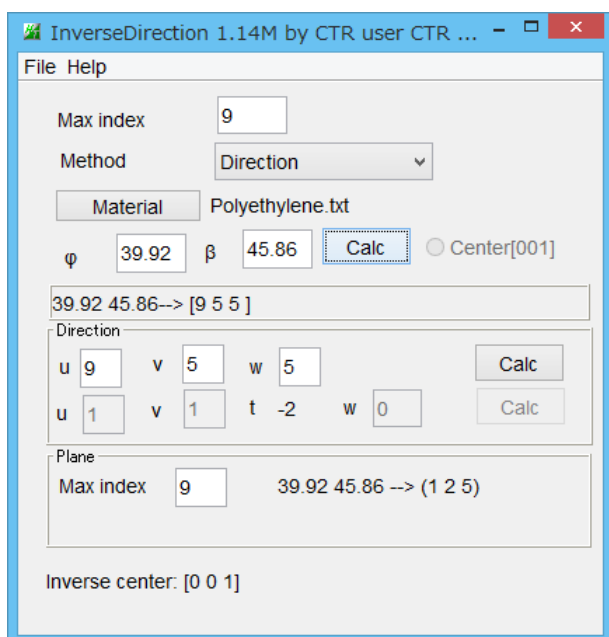
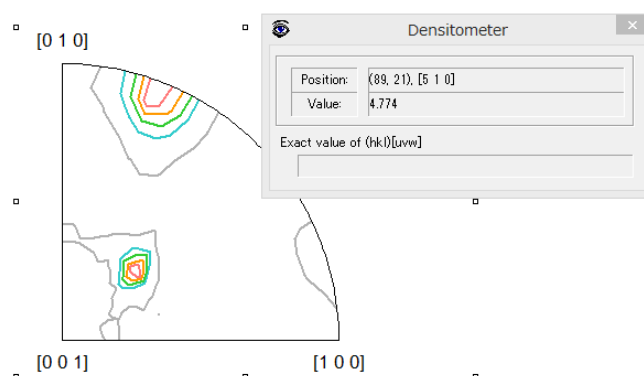
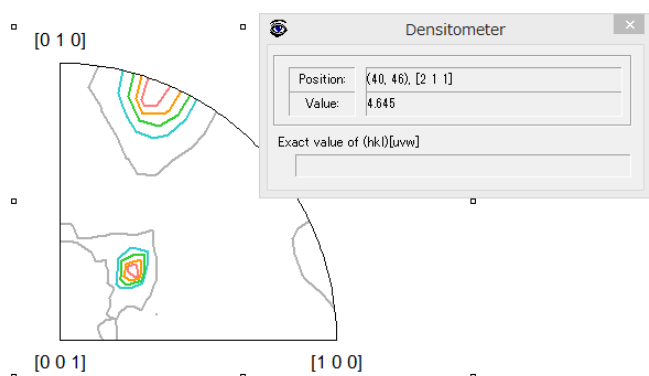
I CDD表記では  $\{110\}$ 、 $\{200\}$ 、 $\{020\}$  の極点図

7.4	(1.0)				
4.93	(0.6662)				
2.54	(0.3432)				
90.0					
90.0					
90.0					
1.54056					
9					
1	1	0	100.0	4.1029	21.642
2	0	0	35.0	3.7	24.032
2	1	0	5.0	2.9593	30.175
0	2	0	20.0	2.465	36.418
0	1	1	25.0	2.2579	39.893

LaboTexの格子定数で解析



逆極点図



Planeで {1 2 5} と {4 3 1} が検出される。