

ポリプロピレンの逆極点図

2016年11月06日



HelperTex Office

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

概要

逆極点図は指定された方向（ND，TD，RDなど）の方位分布図である。

結晶方位 $\{h k l\} \langle u v w \rangle$ における $\{h k l\}$ の法線方向と考えられます。

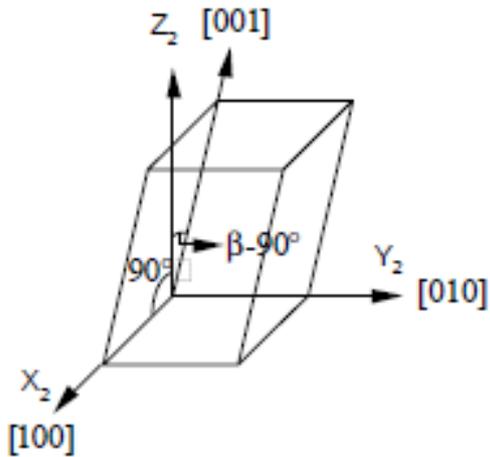
立方晶なら、 $\{h k l\}$ と法線方向は一致するが、立方晶以外は一致しない場合があります。

Polypyleneの単斜晶系（Monoclinic）では更に一致しません。

Monoclinicにおける逆極点図の考え方を示します。

Monoclinicの逆極点図

結晶軸と直交座標系



直交座標系 $X_2 - Y_2 - Z_2$ で考えると逆極点図は、 $[100] - [010] - Z_2$ で表記され、

逆極点図の中心は、 $[001]$ ではなく、 $[100]$ から90度の位置にある $[106]$ になります。

逆極点図の (ϕ, β) と逆極点図方位の関係

逆極点図の真上	90.0 0.0->	[1 0 0]	90度の関係
	85.0 0.0->	[12 0 1]	
	80.0 0.0->	[6 0 1]	
	75.0 0.0->	[15 0 4]	
	70.0 0.0->	[14 0 5]	
	65.0 0.0->	[9 0 4]	
	60.0 0.0->	[13 0 7]	
	55.0 0.0->	[14 0 9]	
	50.0 0.0->	[4 0 3]	
	45.0 0.0->	[8 0 7]	
40.0 0.0->	[1 0 1]	90度の関係	
35.0 0.0->	[11 0 13]		
30.0 0.0->	[8 0 11]		
25.0 0.0->	[8 0 13]		
20.0 0.0->	[8 0 15]		
15.0 0.0->	[3 0 7]		
10.0 0.0->	[1 0 3]		
5.0 0.0->	[1 0 4]		
0.0 0.0->	[1 0 6]		
逆極点図の中心	5.0 180.0->		[1 0 12]
	10.0 180.0->	[0 0 1]	
	15.0 180.0->	[-1 0 11]	
	20.0 180.0->	[-2 0 11]	
	25.0 180.0->	[-2 0 7]	
	30.0 180.0->	[-5 0 13]	
	35.0 180.0->	[-1 0 2]	
	40.0 180.0->	[-9 0 14]	
	45.0 180.0->	[-4 0 5]	
	50.0 180.0->	[-1 0 1]	
逆極点図の真下	55.0 180.0->	[-8 0 5]	90度の関係
	60.0 180.0->	[-3 0 2]	
	65.0 180.0->	[-15 0 8]	
	70.0 180.0->	[-5 0 2]	
	75.0 180.0->	[-10 0 3]	
	80.0 180.0->	[-5 0 1]	
	85.0 180.0->	[-10 0 1]	
	90.0 180.0->	[-1 0 0]	

逆極点中心方位の計算

方位 $[100]$ から 90° の逆格子方位面角度計算を行う。

Polypylene の場合 $[106]$ である。

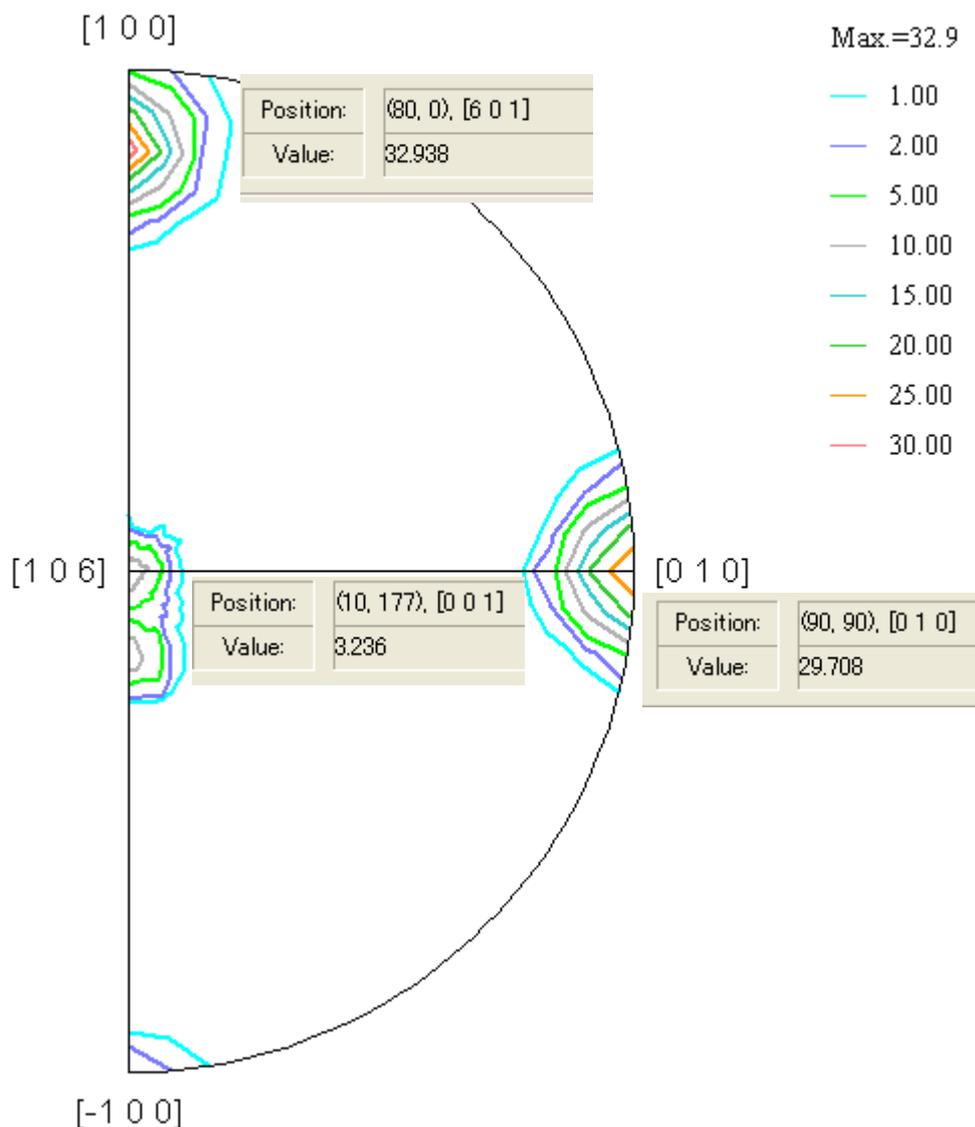
方位 $[hk1]$ から逆極点 (ϕ, β)

ϕ 角度計算は、逆極点図中心からの角度であるので、 $[106]$ から $[hk1]$ の逆格子角度

β 角度計算は、 $[100]$ からの角度であるので、 $[100]$ から $[hk1]$ の X-Y 面への投影であるので $[hk0]$ の逆格子角度

では、結晶方位 $\{100\} \langle 001 \rangle$ 、 $\{010\} \langle 001 \rangle$ 、 $\{001\} \langle 100 \rangle$ が含まれる逆極点図を考える

LaboTex で結晶方位から極点図を作成し、TexTools で逆極点図を作成



$\{100\}$ の法線方向が $[601]$ として検出される。

$[601]$ と 90° 関係の $[001]$ は中心から外れて検出される。

R は計算エラーの指標

入力(ϕ, β)と計算(ϕ, β)の差の2乗和

計算に使用する最大ミラー指数に左右される

逆極点図の中心を [0 0 1] と比較

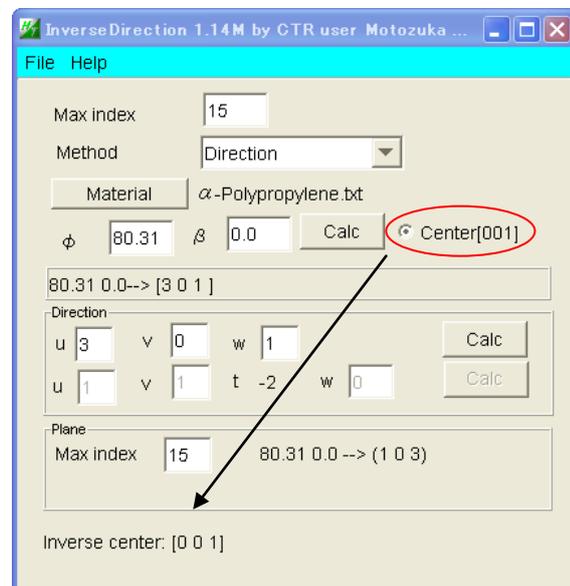
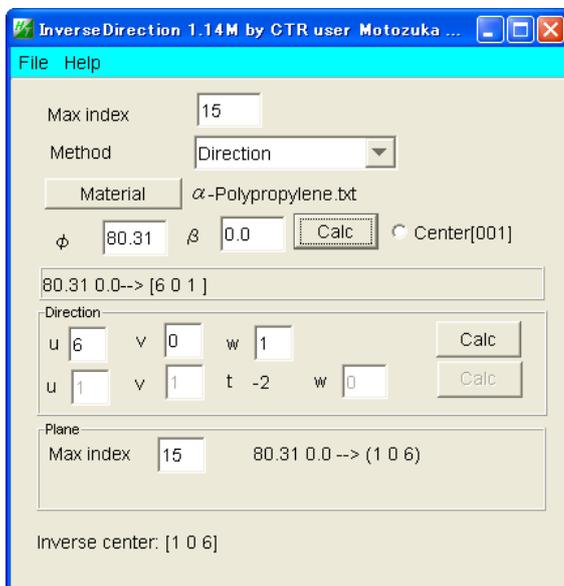
Directionで計算

Monoclinic Direction test mode= [1 0 6] MaxIndex=9						Monoclinic Direction test mode= [0 0 1] MaxIndex=9					
R	Calc ϕ	Calc β	In ϕ	In β	Calc[hkl]	R	Calc ϕ	Calc β	In ϕ	In β	Calc[hkl]
R=0.29	89.71	0.0	90.0	0.0->	[1 0 0]	R=0.1	90.1	0.0	90.0	0.0->	[6 0 1]
R=0.31	80.31	0.0	80.0	0.0->	[6 0 1]	R=0.69	80.69	0.0	80.0	0.0->	[3 0 1]
R=0.9	70.9	0.0	70.0	0.0->	[3 0 1]	R=1.05	68.95	0.0	70.0	0.0->	[9 0 5]
R=0.84	59.16	0.0	60.0	0.0->	[9 0 5]	R=0.04	59.96	0.0	60.0	0.0->	[4 0 3]
R=0.18	50.18	0.0	50.0	0.0->	[4 0 3]	R=0.42	50.42	0.0	50.0	0.0->	[1 0 1]
R=0.63	40.63	0.0	40.0	0.0->	[1 0 1]	R=0.76	39.24	0.0	40.0	0.0->	[5 0 7]
R=0.55	29.45	0.0	30.0	0.0->	[5 0 7]	R=1.22	28.78	0.0	30.0	0.0->	[1 0 2]
R=1.01	18.99	0.0	20.0	0.0->	[1 0 2]	R=0.44	19.56	0.0	20.0	0.0->	[1 0 3]
R=0.23	9.77	0.0	10.0	0.0->	[1 0 3]	R=0.21	9.79	0.0	10.0	0.0->	[1 0 6]
R=0.0	0.0	0.0	0.0	0.0->	[1 0 6]	R=0.74	9.26	180.0	10.0	180.0->	[-1 0 6]
R=0.21	9.79	180.0	10.0	180.0->	[0 0 1]	R=0.46	19.54	180.0	20.0	180.0->	[-3 0 8]
R=0.8	20.8	180.0	20.0	180.0->	[-1 0 5]	R=1.09	31.09	90.0	30.0	180.0->	[-2 0 3]
R=0.44	30.44	180.0	30.0	180.0->	[-2 0 5]	R=0.73	40.73	180.0	40.0	180.0->	[-1 0 1]
R=0.58	39.42	180.0	40.0	180.0->	[-5 0 8]	R=0.31	50.31	180.0	50.0	180.0->	[-3 0 2]
R=0.52	50.52	180.0	50.0	180.0->	[-1 0 1]	R=0.68	59.32	180.0	60.0	180.0->	[-7 0 3]
R=0.09	60.09	180.0	60.0	180.0->	[-3 0 2]	R=1.22	68.78	180.0	70.0	180.0->	[-9 0 2]
R=0.32	70.32	180.0	70.0	180.0->	[-5 0 2]	R=0.5	80.5	180.0	80.0	180.0->	[-1 0 0]
R=0.32	79.68	180.0	80.0	180.0->	[-5 0 1]	R=0.1	89.9	180.0	90.0	180.0->	[-6 0 -1]
R=0.29	90.29	180.0	90.0	180.0->	[-1 0 0]						

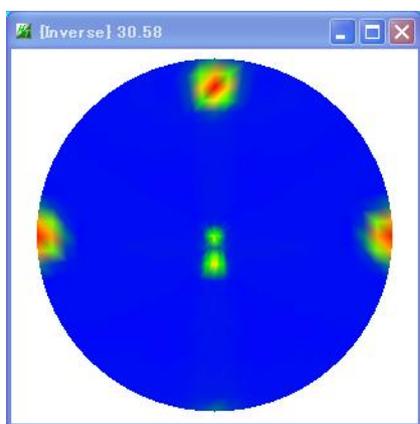
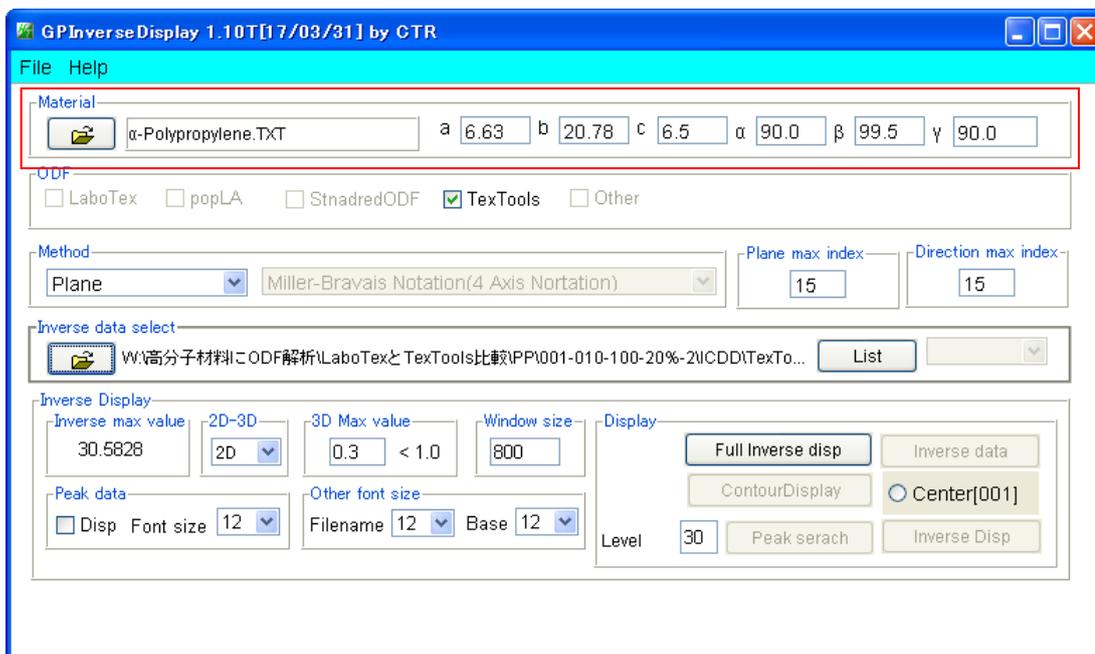
Planeで計算

CTRソフトウェアで扱う領域

Monoclinic Plane test mode= (1 0 -6) MaxIndex=9						Monoclinic Plane test mode= (0 0 1) MaxIndex=9					
R	Calc ϕ	Calc β	In ϕ	In β	Calc[hkl]	R	Calc ϕ	Calc β	In ϕ	In β	Calc[hkl]
R=0.1	90.1	0.0	90.0	0.0->	(1 0 0)	R=0.29	90.29	0.0	90.0	0.0->	(6 0 -1)
R=0.31	80.31	0.0	80.0	0.0->	(6 0 -1)	R=0.5	80.5	0.0	80.0	0.0->	(1 0 0)
R=0.54	70.54	0.0	70.0	0.0->	(3 0 -1)	R=0.51	69.49	0.0	70.0	0.0->	(5 0 1)
R=1.32	61.32	0.0	60.0	0.0->	(2 0 -1)	R=0.16	59.84	0.0	60.0	0.0->	(5 0 2)
R=0.72	49.28	0.0	50.0	0.0->	(4 0 -3)	R=0.59	49.41	0.0	50.0	0.0->	(3 0 2)
R=0.32	39.68	0.0	40.0	0.0->	(1 0 -1)	R=0.23	39.77	0.0	40.0	0.0->	(1 0 1)
R=0.13	30.13	0.0	30.0	0.0->	(3 0 -4)	R=0.19	30.19	0.0	30.0	0.0->	(2 0 3)
R=1.15	21.15	0.0	20.0	0.0->	(5 0 -9)	R=0.04	19.96	0.0	20.0	0.0->	(2 0 5)
R=0.59	9.41	0.0	10.0	0.0->	(1 0 -3)	R=0.61	10.61	0.0	10.0	0.0->	(1 0 5)
R=0.0	0.0	0.0	0.0	0.0->	(1 0 -6)				0.0	0.0->	(0 0 1)
R=5.43	15.43	180.0	10.0	180.0->	(-1 0 -9)	R=0.6	9.4	180.0	10.0	180.0->	(-1 0 6)
R=0.01	20.01	180.0	20.0	180.0->	(-1 0 -5)	R=1.11	21.11	180.0	20.0	180.0->	(-3 0 8)
R=0.59	30.59	180.0	30.0	180.0->	(-3 0 -7)	R=0.55	30.55	180.0	30.0	180.0->	(-5 0 9)
R=0.4	39.6	180.0	40.0	180.0->	(-2 0 -3)	R=0.46	39.54	180.0	40.0	180.0->	(-3 0 4)
R=0.83	49.17	180.0	50.0	180.0->	(-1 0 -1)	R=0.92	49.08	180.0	50.0	180.0->	(-1 0 1)
R=0.27	60.27	180.0	60.0	180.0->	(-8 0 -5)	R=0.26	60.26	180.0	60.0	180.0->	(-7 0 5)
R=0.37	70.37	180.0	70.0	180.0->	(-8 0 -3)	R=0.72	70.72	180.0	70.0	180.0->	(-2 0 1)
R=0.64	80.64	180.0	80.0	180.0->	(-6 0 -1)	R=0.06	79.94	180.0	80.0	180.0->	(-3 0 1)
R=0.1	89.9	180.0	90.0	180.0->	(-1 0 0)	R=0.29	89.71	180.0	90.0	180.0->	(-6 0 1)



GPInverseDisplayで読み込む



上下非対称であるが、GPInverseDisPlay では 1/4 で扱う。



では

```
[6 0 1]      80.917 0.0    30.583 80.917 90.0
[0 1 0]      90.0    90.0    29.602 90.0    0.0
```

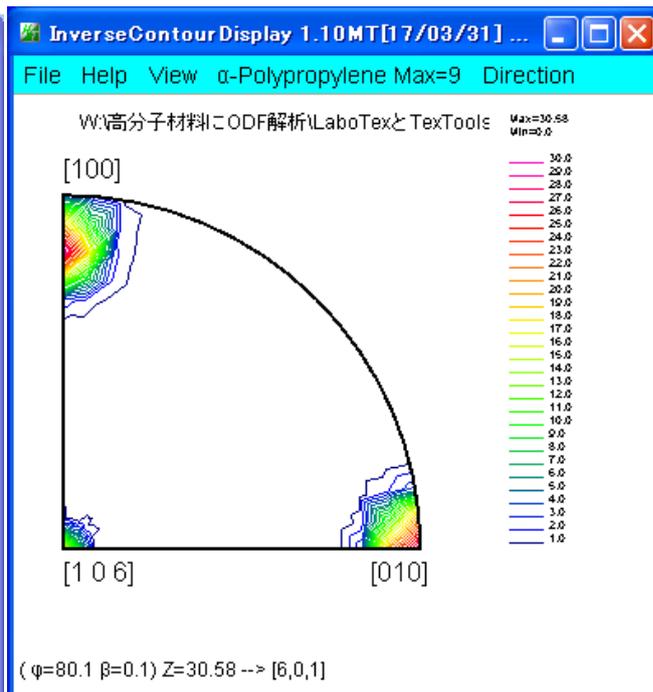
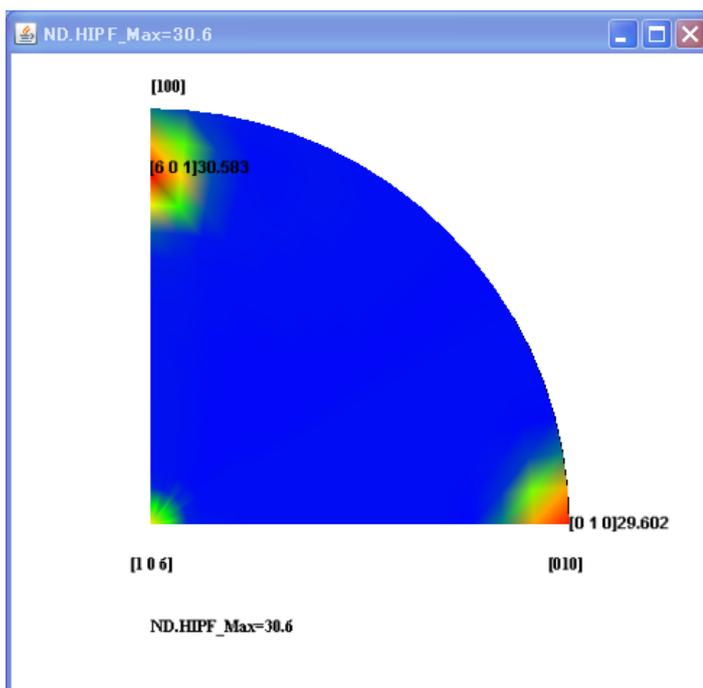


では

```
{1 0 0}      80.917 0.0    30.583 80.917 90.0
{0 1 0}      90.0    90.0    29.602 90.0    0.0
```

逆極点図は、

Method: Miller-Bravais Notation(4 Axis Nortation) Plane max index: Direction max index: Center[001]



Method: Miller-Bravais Notation(4 Axis Nortation) Plane max index: Direction max index: Center[001]

