

P o l y p r o p y l e n e の極点図、ODF 図

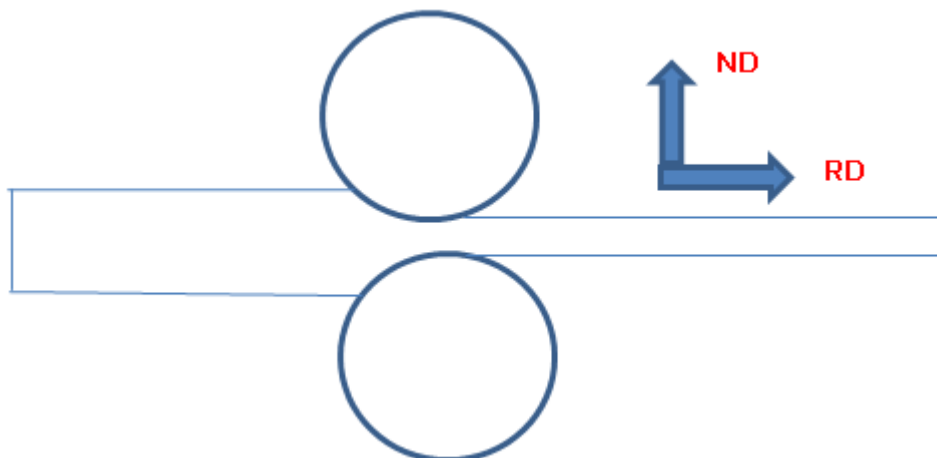
2016年06月20日

HelperTex Office

odftex@ybb.ne.jp

概要

Polypropylene の方位解析を行うにあたり、極点図と ODF 図に関して説明し、方位解析を理解する。方位解析では、アルミニウムや鉄などの立方晶(Cubic)に関して理解してから Monoclinic である Polypropylene の解説を行います。PPOrientation, LaboTex, TexTools を用いる方位解析では、試料表面と圧延方向を基準としています。

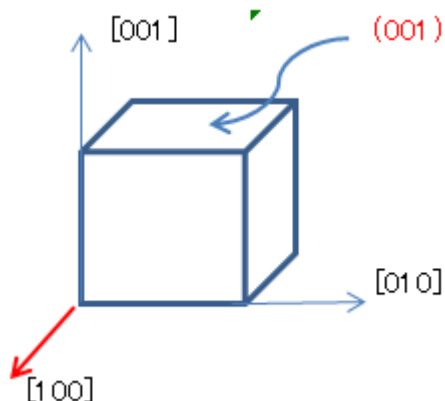


この材料系 (ND-RD) に対し、結晶粒の配置状態を結晶方位 $(h k l)$ $[u v w]$ を表現しています。

すなわち、ND方向と直交する試料表面と平行な結晶面が $(h k l)$

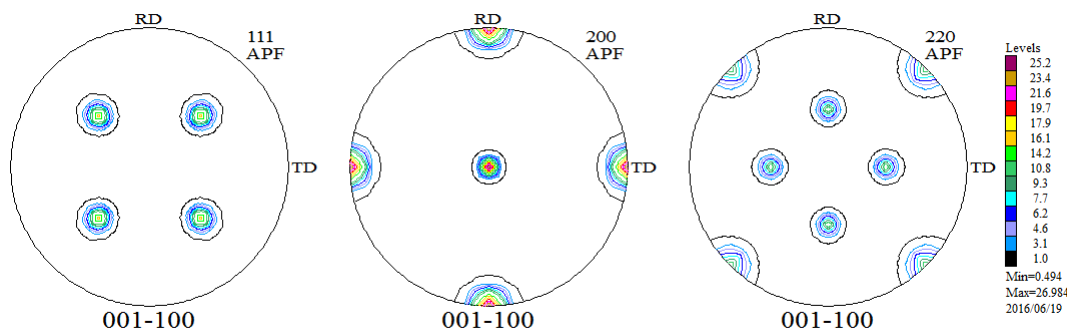
RD方向と平行な結晶軸方向が $[u v w]$ として表現しています。

Cubicの場合結晶方位 $(0 0 1)$ $[1 0 0]$ とは



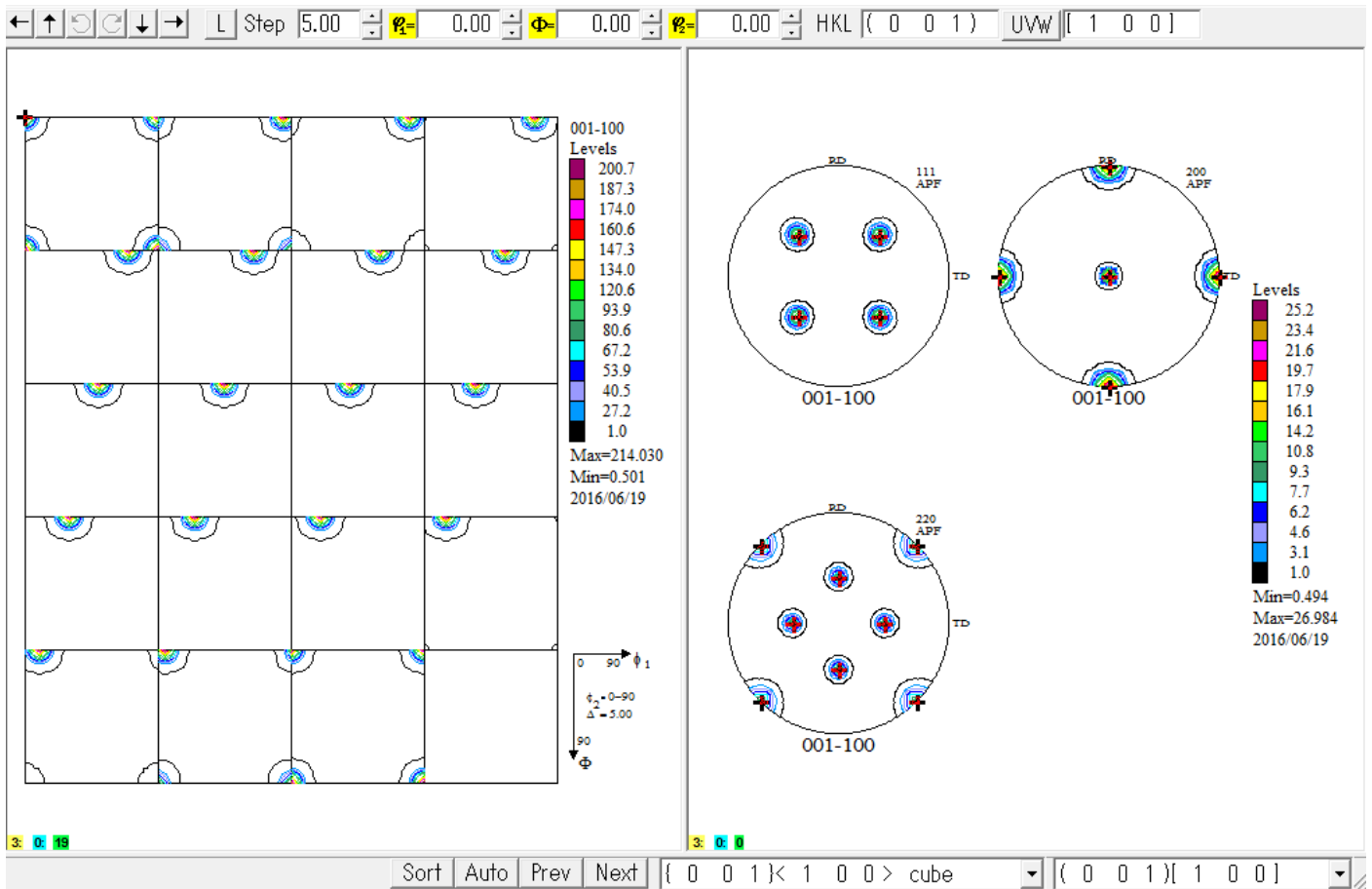
材料表面が、 $(0 0 1)$ で圧延方向が $[1 0 0]$ で材料軸と結晶軸が一致している状態です。

極点図は、

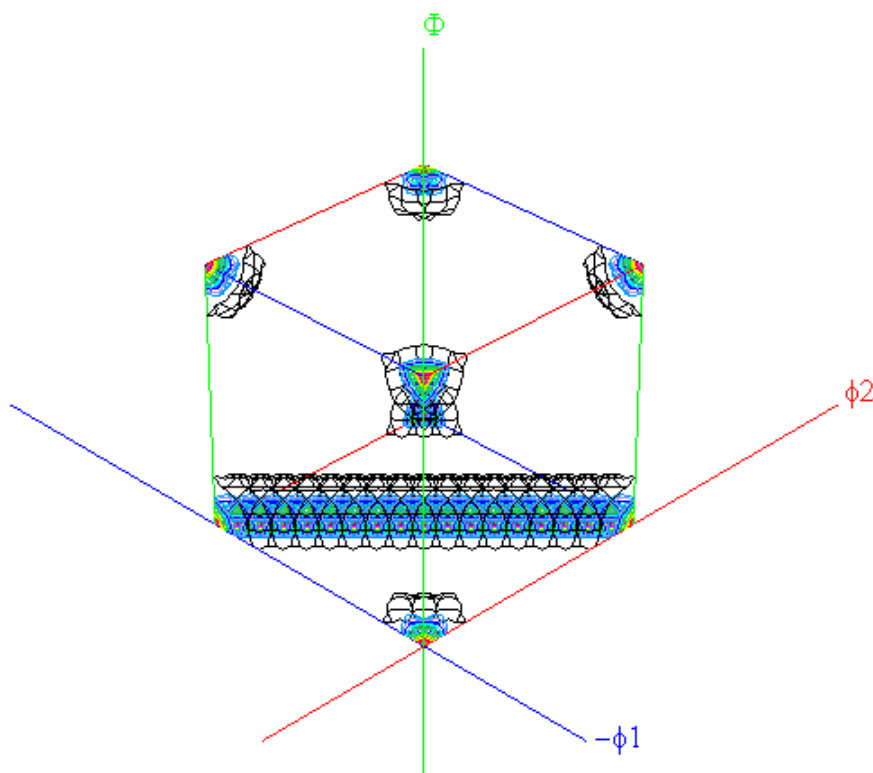


{001} <100>極点図とODF図

方位密度の高い位置をマウスクリックすると、結晶方位と極点図上の極密度位置に+印が表示する



ODF図は、方位密度をEuler空間で表示しています。



これが立方晶の {001} <100>方位でCube方位と呼ばれています。

Euler空間における結晶方位の存在

Euler角度 (ϕ_1 , Φ , ϕ_2) で表現される。

Cube方位 (001) [100] はEuler角度で (0, 0, 0) と表現される。



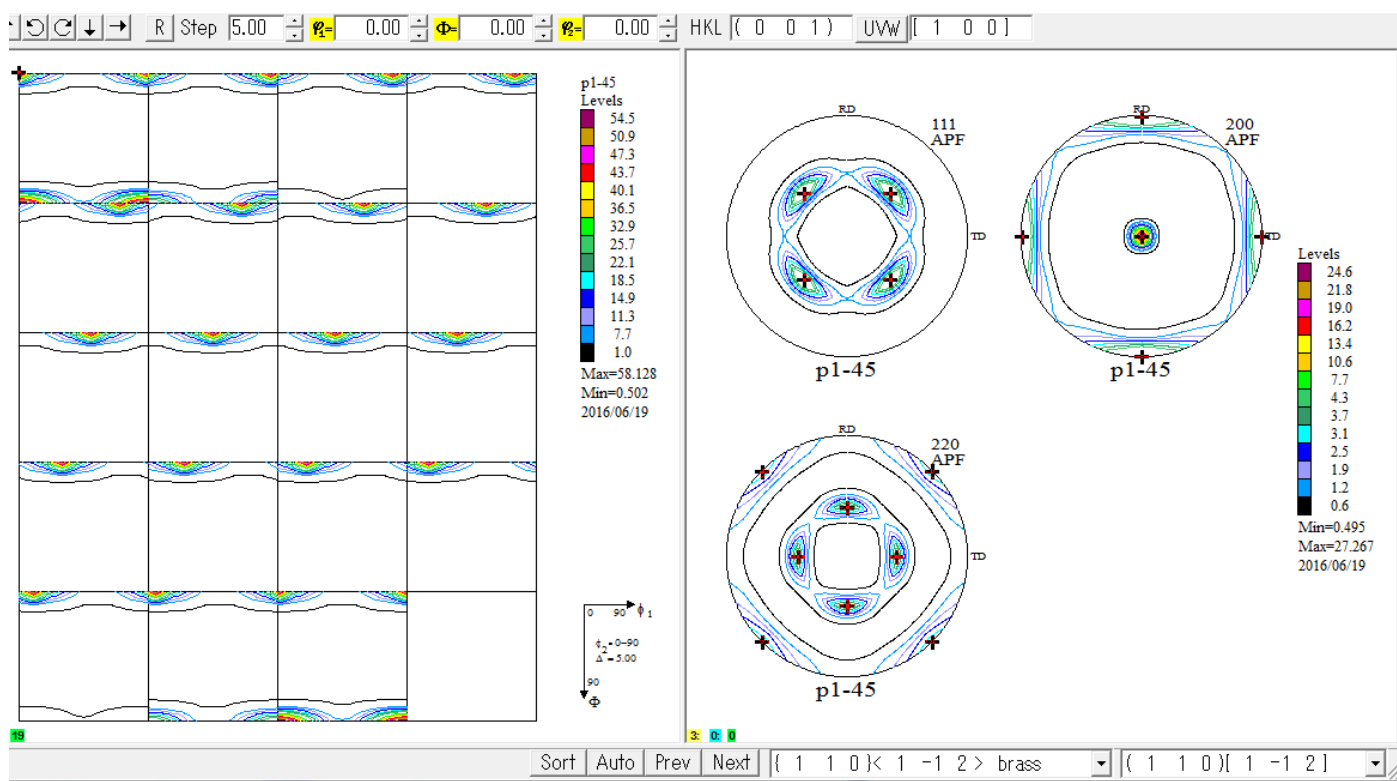
(0, 0, 0) はEuler空間上の1点ですが、方位は広がりを持って存在しています。
又、対称の方位を含めて場合 {001} <100> と表現します。

Approx. Miller Indices	Euler Angles
(0 0 1) [1 0 0]	[0.00, 0.00, 0.00]
(0 1 0) [1 0 0]	[0.00, 90.00, 0.00]
(0 1 0) [0 0 1]	[90.00, 90.00, 0.00]
(0 0 1) [0 -1 0]	[90.00, 0.00, 0.00]
(0 0 1) [0 -1 0]	[0.00, 0.00, 90.00]
(1 0 0) [0 -1 0]	[0.00, 90.00, 90.00]
(1 0 0) [0 0 1]	[90.00, 90.00, 90.00]
(0 0 1) [-1 0 0]	[90.00, 0.00, 90.00]

広がりは、3方向に対し同一であれば、球状態で、等しくなければラクビーボール状態になります。
圧延、延伸していれば、ラクビーボール状になります。

今まで扱った広がり半幅は10degのGauss関数で表現していました。

では、 ϕ_1 の半幅を45度とした場合のODF図、極点図はどうなるか？



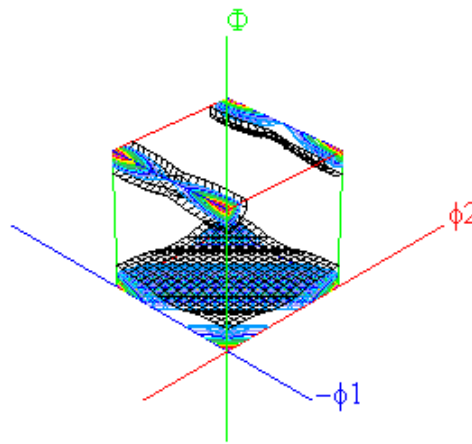
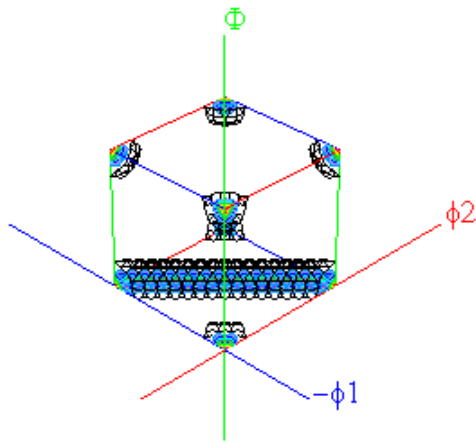
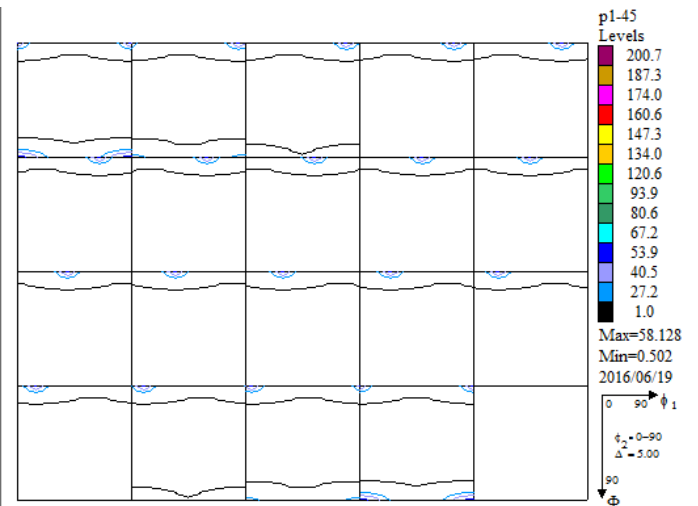
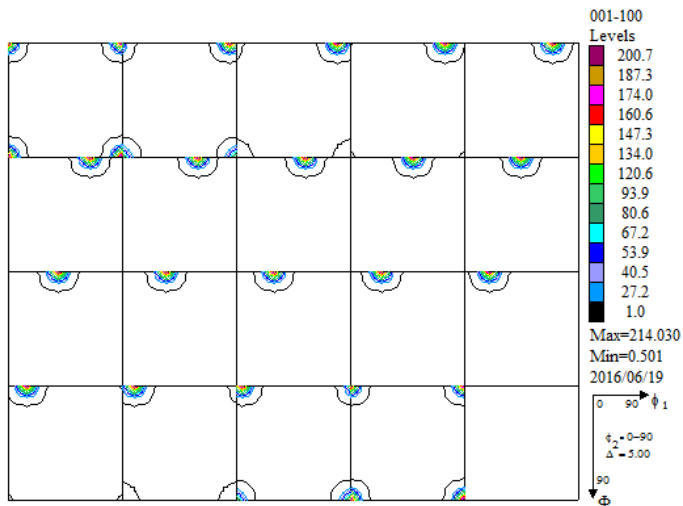
ODF図は、 ϕ_1 方向に広がり、極点図は、 β 回転方向に広がっています。

又、方位密度、極密度の最大値が低下しています。

ODFの3次元比較

Euler 角度の広がり (10, 10, 10)

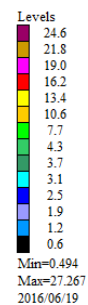
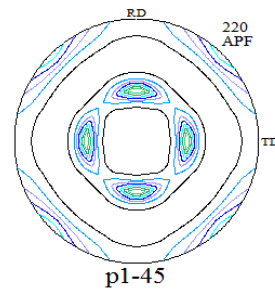
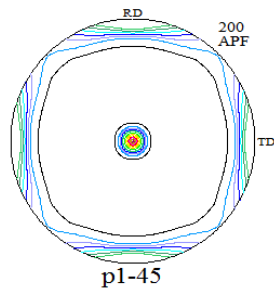
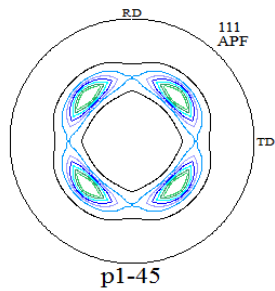
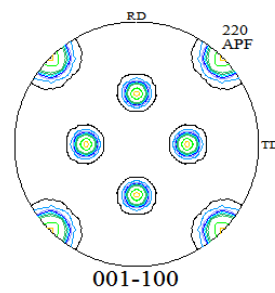
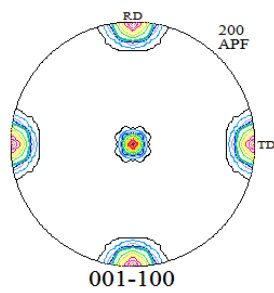
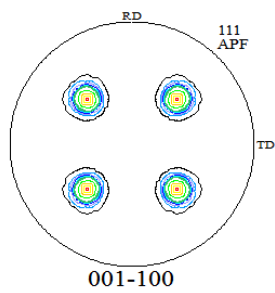
(45, 10, 10)



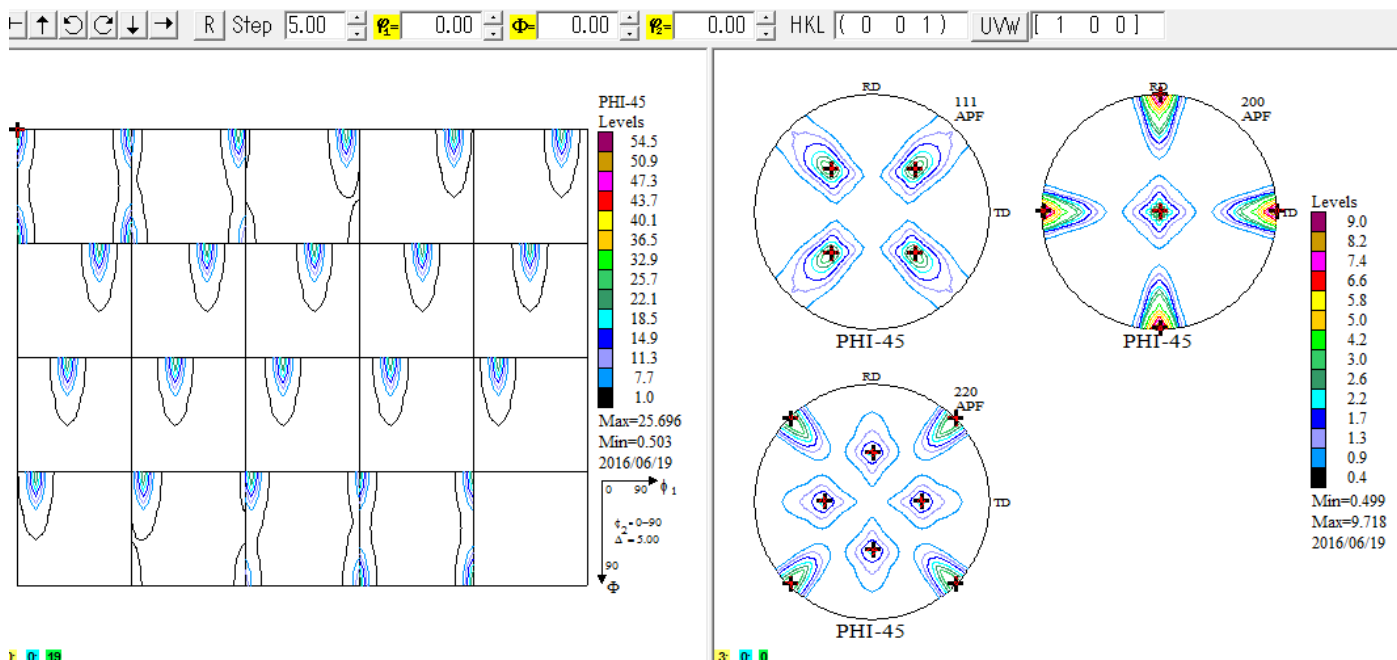
極点図比較

上段が、(10, 10, 10)

下段が (45, 10, 10)

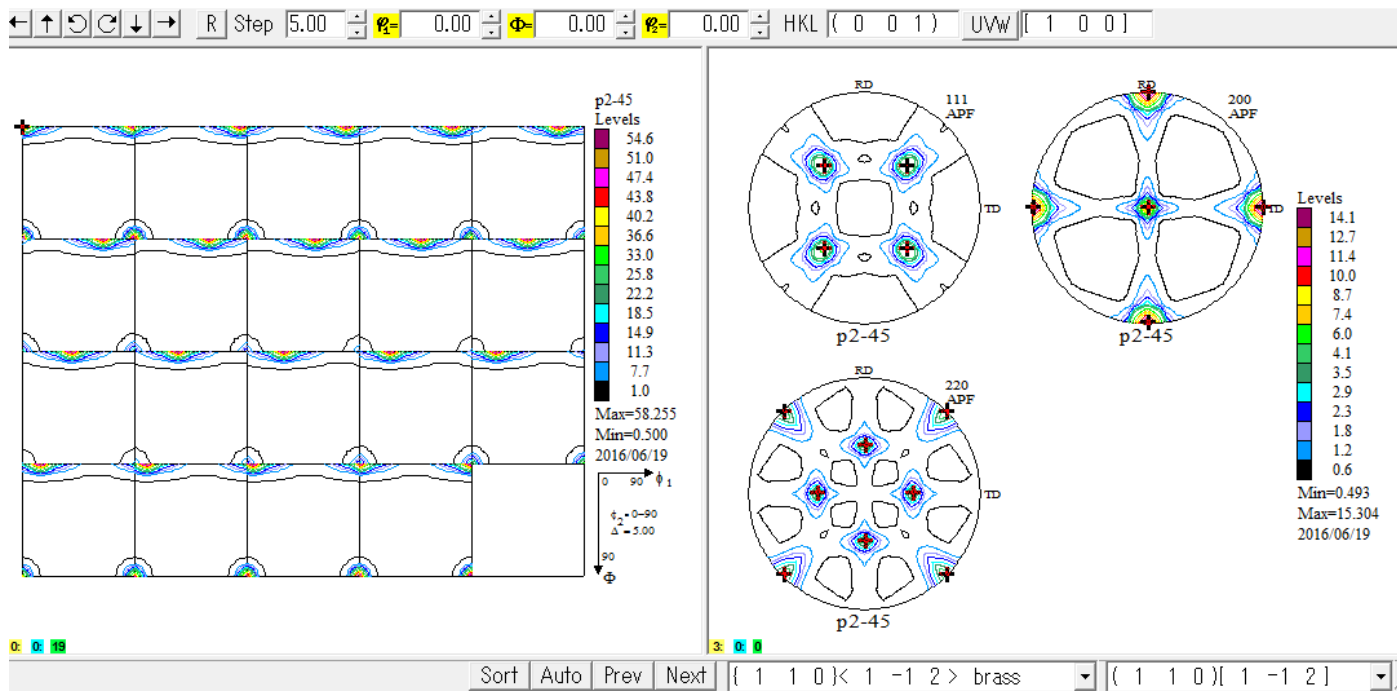


Φ が45の広がりの場合 (10, 45, 10)



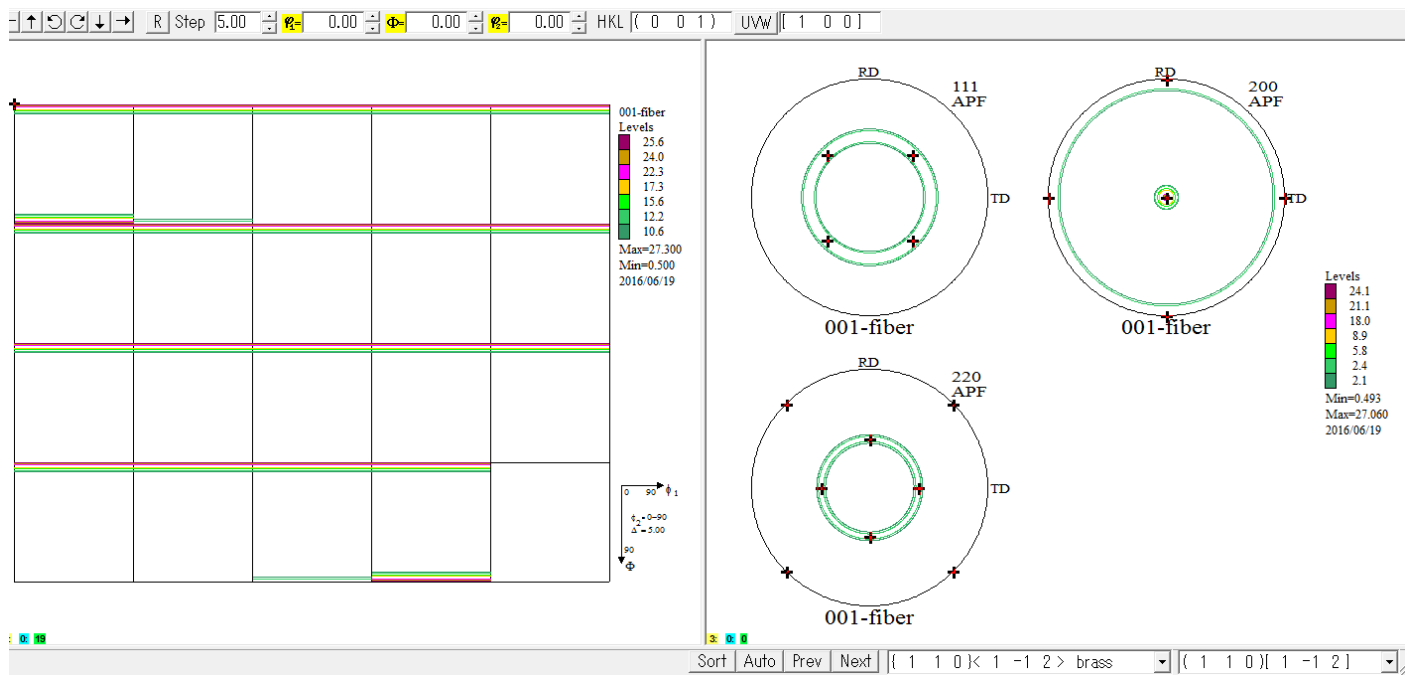
ODF図は、 Φ 方向に広がり、極点図は、 α 回転方向に広がっています。
 又、方位密度、極密度の最大値が低下しています。

同様に ϕ_2 が45度広がった場合 (10, 10, 45)

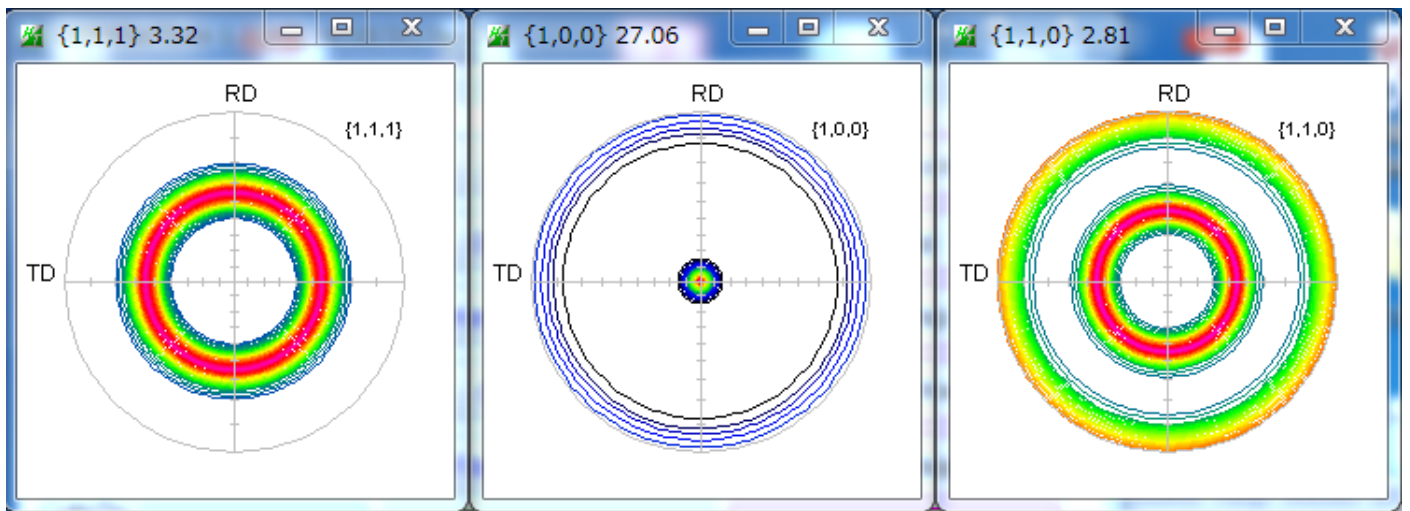


ODF図は、 Φ 方向に広がり、極点図は、 α 回転方向と β 回転方向に少し広がっています。
 又、方位密度、極密度の最大値が低下しています。

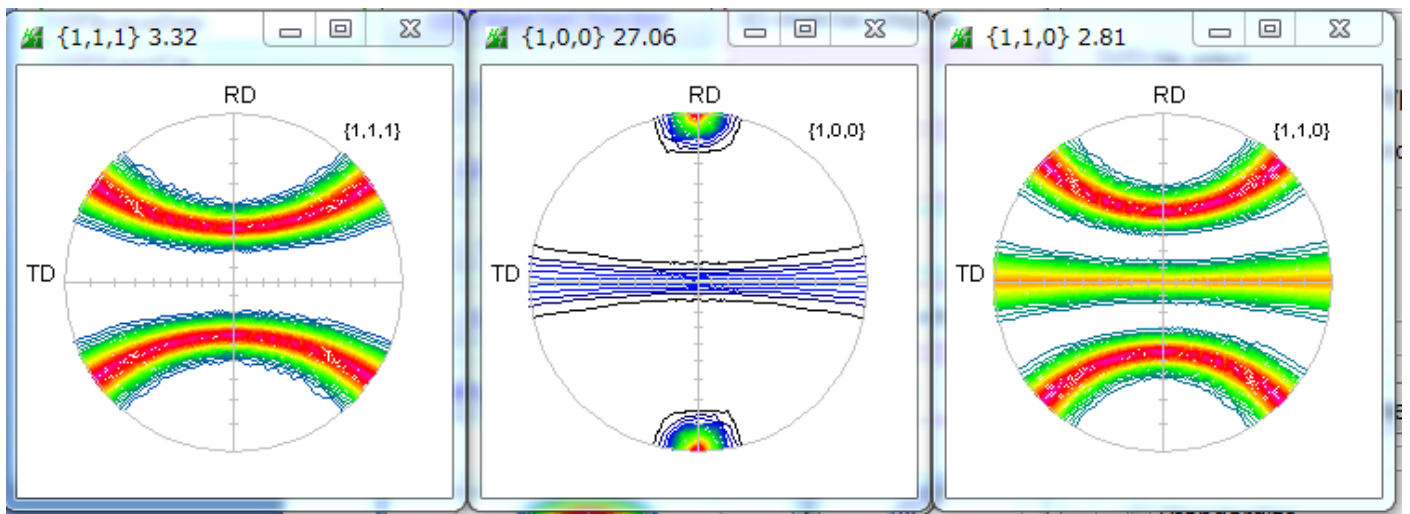
では、 ϕ 1 方向の広がり半価幅を最大状態（直線関数）（ ∞ 、1 0、1 0）とした場合



このような状態を F i b e r 状態とされています。



F i b e r 極点図を T D 軸に回転すると



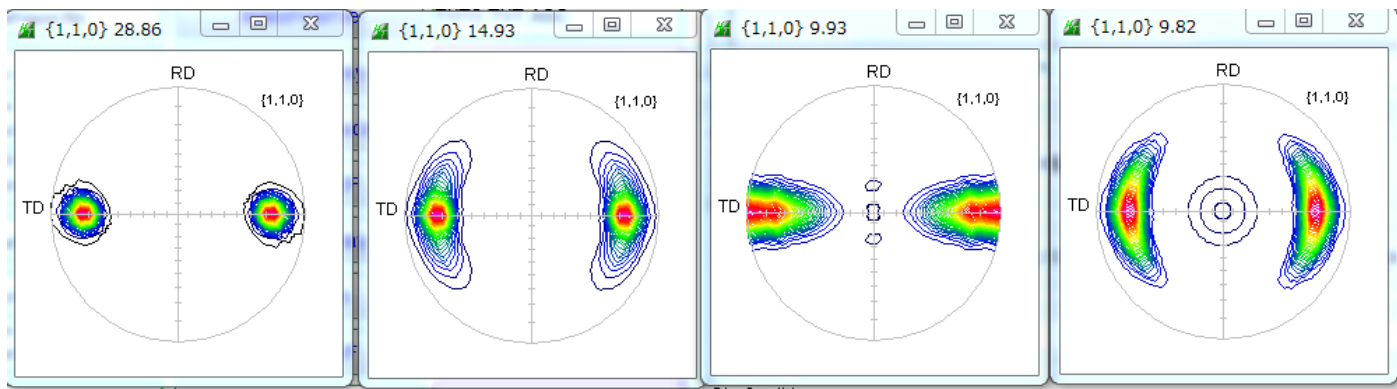
F i b e r から 1 軸配向状態に変わります。

では、P o l y p r o p y l e n e の解説を行います。

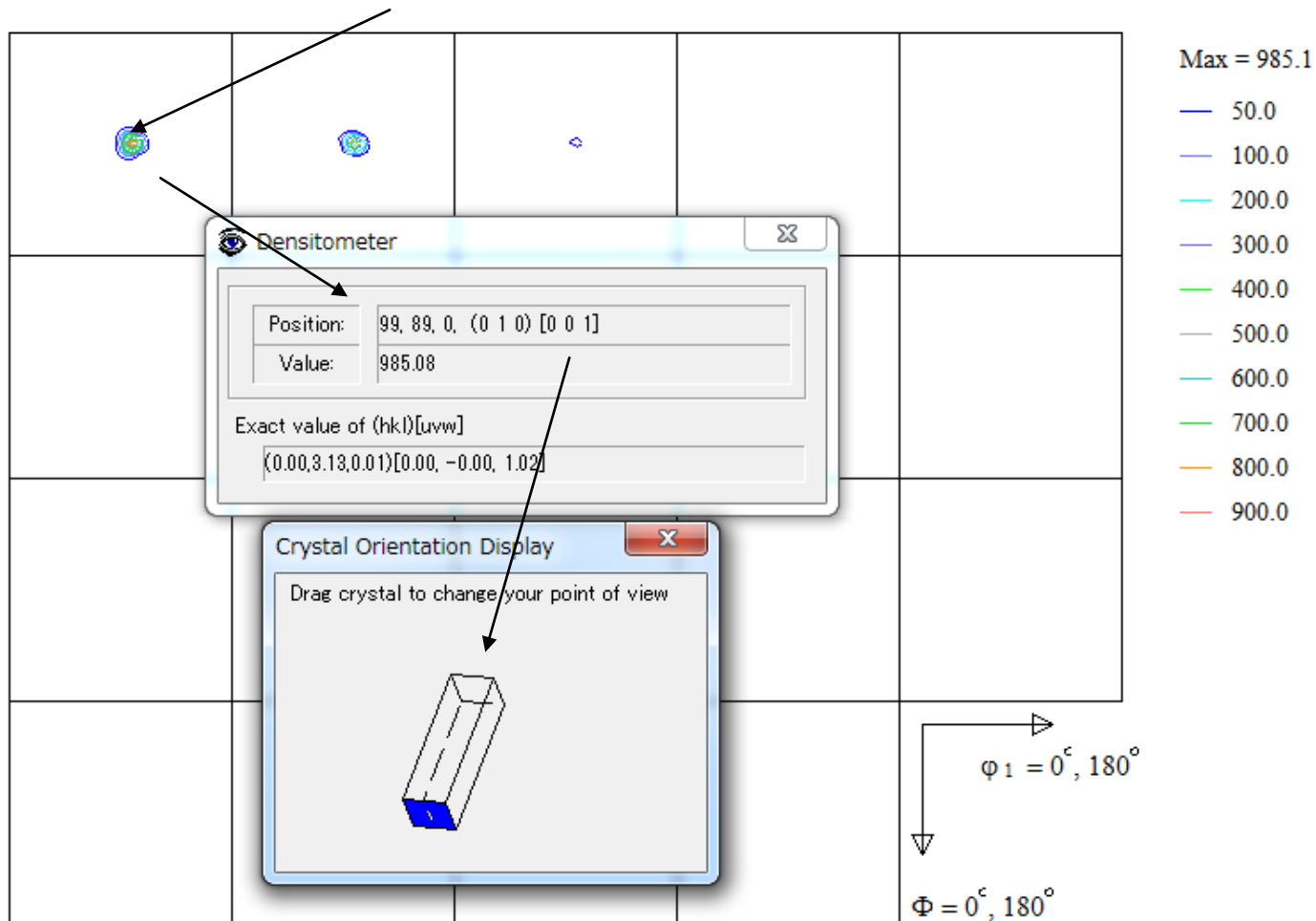
Polypyleneで見かける極点図

{010} <001>方位に対し、Euler角度 (ϕ_1 , Φ , ϕ_2) を45度した極点図です。
 広がりを含めた場合の結晶方位の定量値 (VolumeFraction) は50%です。

(10, 10, 10) (45, 10, 10) (10, 45, 10) (10, 10, 45)



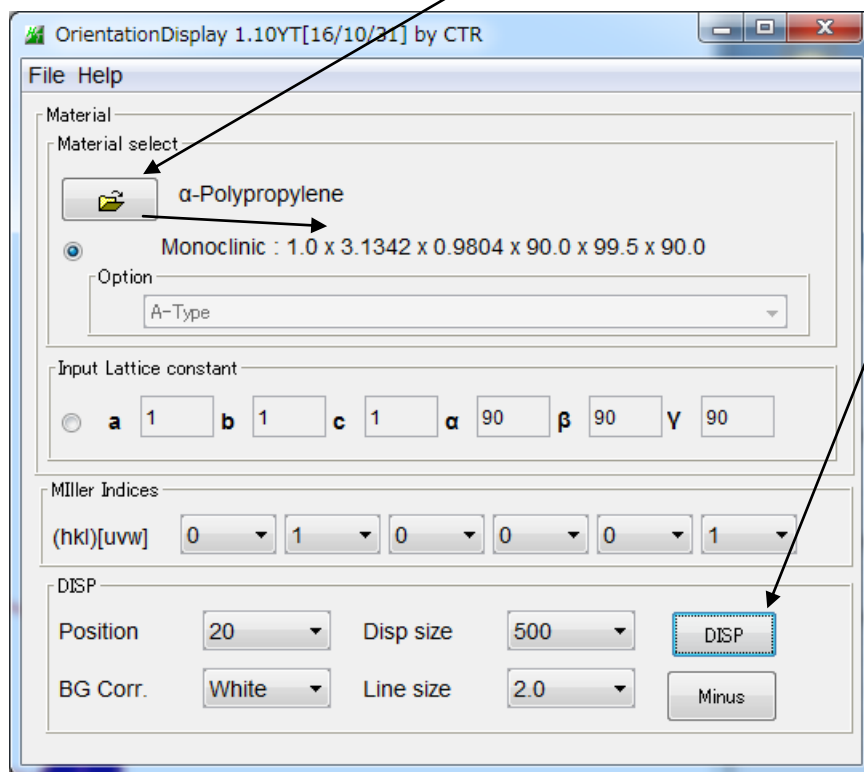
ODF解析で方位密度の最大値にマウスカーソルを持っていくと結晶方位は (010) [001]



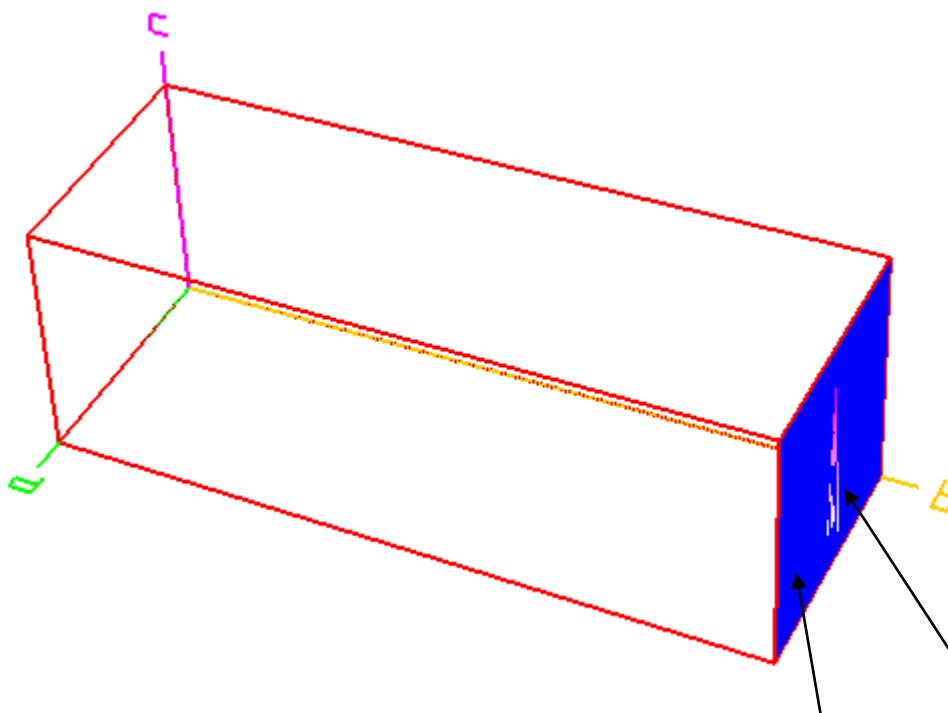
(0 1 0) [0 1 0] OrientationDisplay で表示

P o l y p r o p y l e n e を選択して格子定数を決める

(0 1 0) [0 1 0] を入力してDISP



格子定数選択時 ICDD 或いは LaboTex の選択が可能

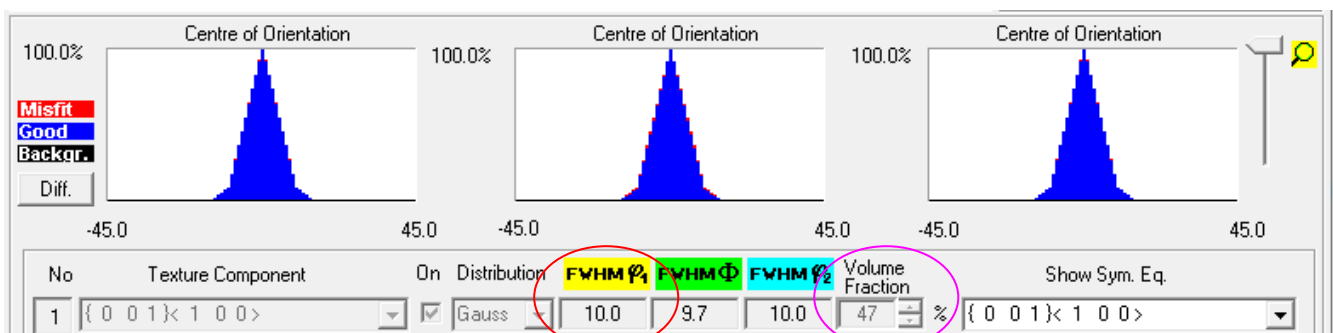


試料表面平行な面は (0 1 0)

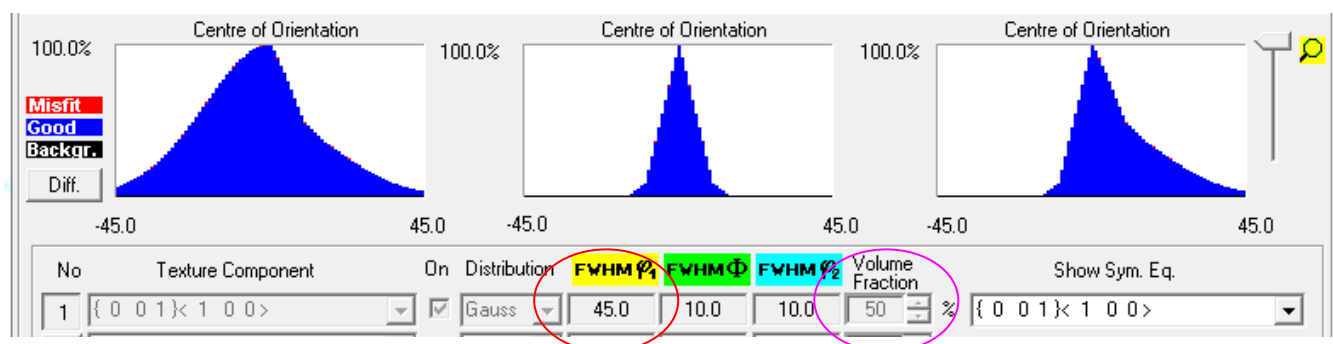
RD方向と平行な方向は [0 0 1] である。

LaboTexによる結晶方位の自動定量計算 (Volume Fraction) 比較
 LaboTexでは格子定数の取り方を変えて計算するので、結晶方位表現が異なります

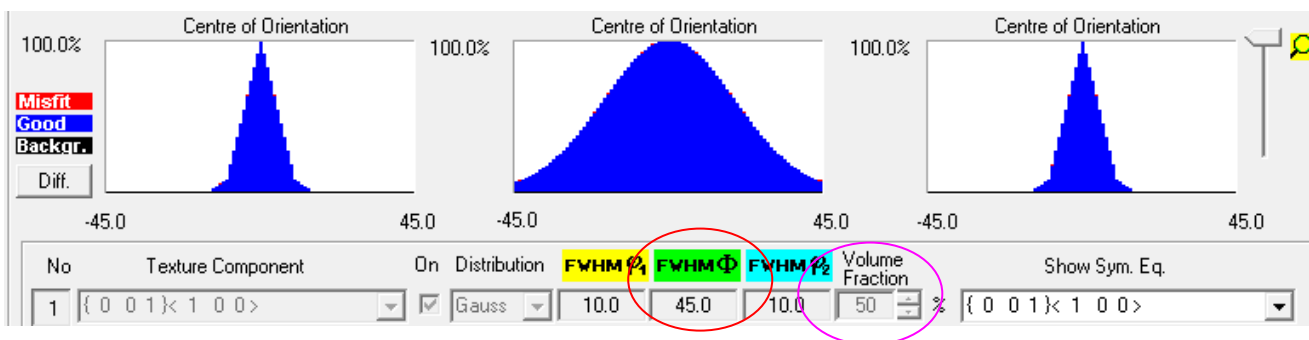
(10, 10, 10) Fit Error% (*1000): 2379.



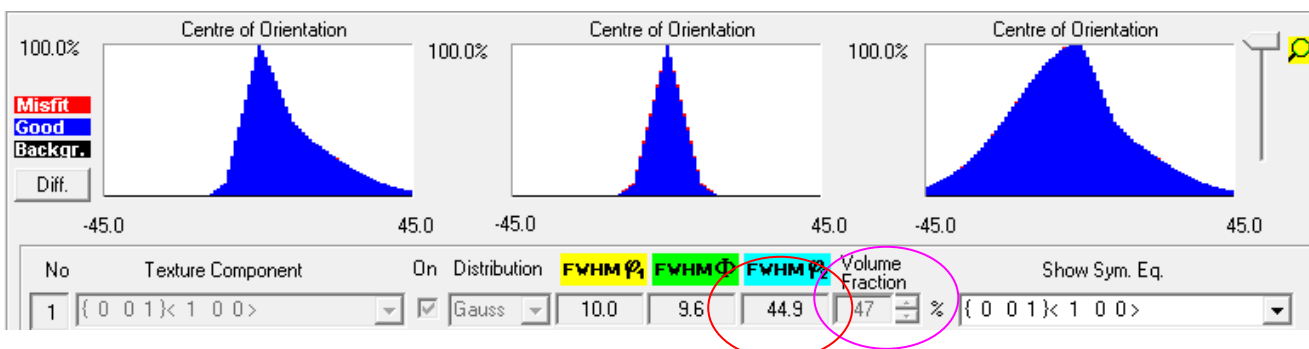
(45, 10, 10) Fit Error% (*1000): 283.



(10, 45, 10) Fit Error% (*1000): 326.




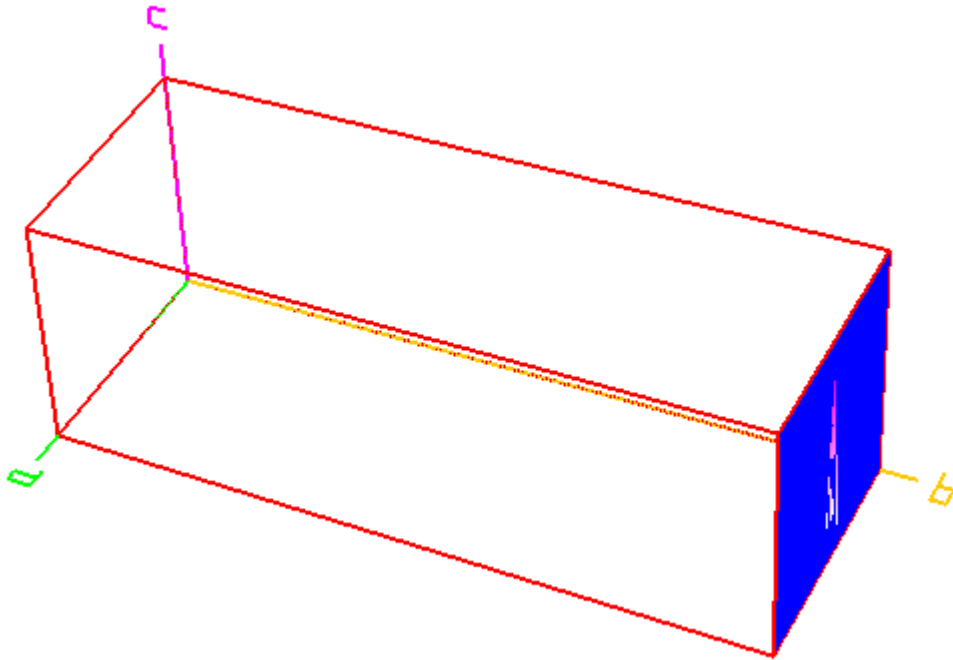
(10, 10, 45) Fit Error% (*1000): 2664.




ICDDとLaboTexの格子定数の取り方による結晶方位図比較

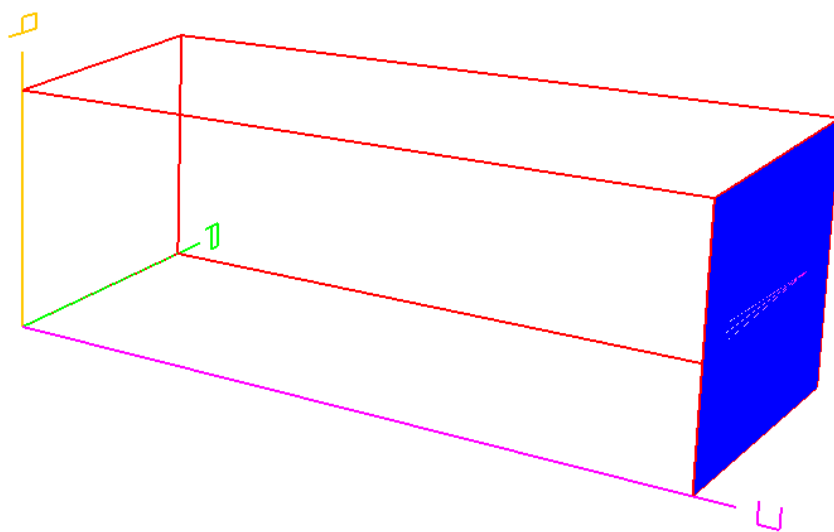
ICDD表現

 **α-Polypropylene**
Monoclinic : 1.0 x 3.1342 x 0.9804 x 90.0 x 99.5 x 90.0 (0 1 0) [0 1 0]



LaboTex表現 (結晶軸[001]とZ軸を一致させる)

 **α-Polypropylene**
Monoclinic : 1.0 x 1.02 x 3.1969 x 90.0 x 90.0 x 80.5 (0 0 1) [1 0 0]



I C D D と L a b o T e x の格子定数、ミラー指数

I C D D

α-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
1	5	0	2.6	3.5075	25.372
0	6	0	10.8	3.4633	25.701
1	4	1	2.8	3.2854	27.119
-1	5	1	1.9	3.1986	27.869
0	1	2	1.5	3.168	28.145
2	2	0	8.8	3.1188	28.598
-2	1	1	1.6	3.0943	28.829
-1	0	2	1.6	3.0866	28.903
0	2	2	6.5	3.063	29.13
-2	2	1	0.2	2.9962	29.794

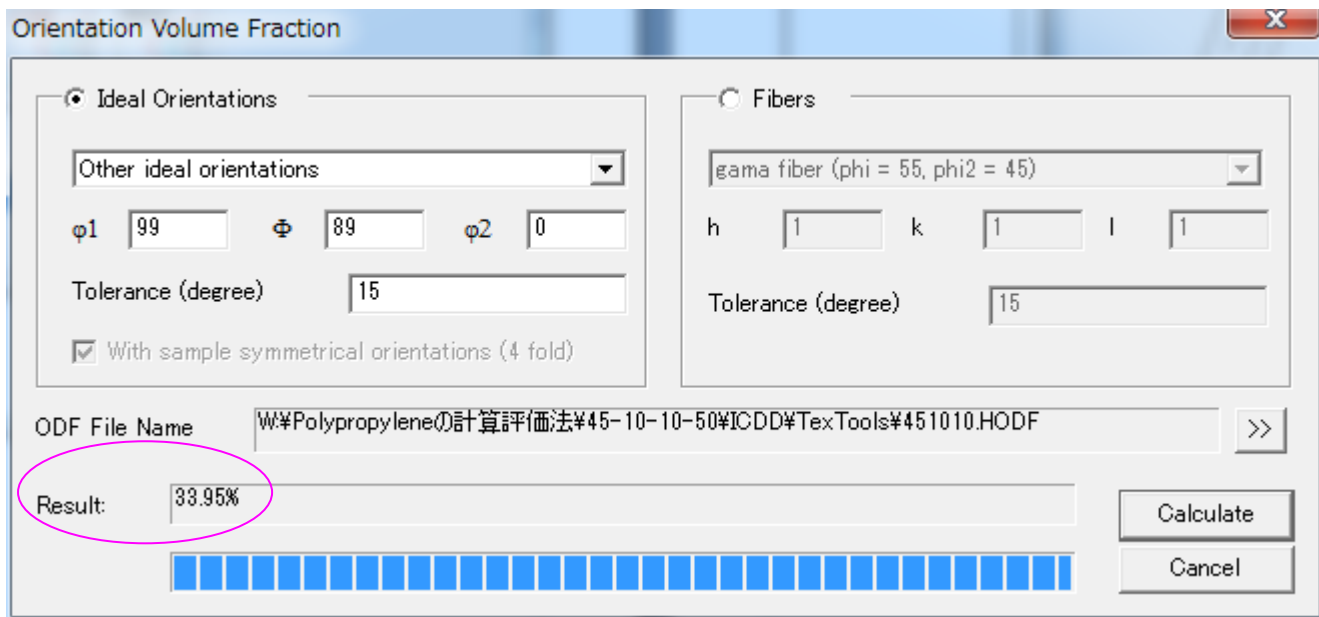
L a b o T e x

α-PolypropyleneDISP
Monoclinic

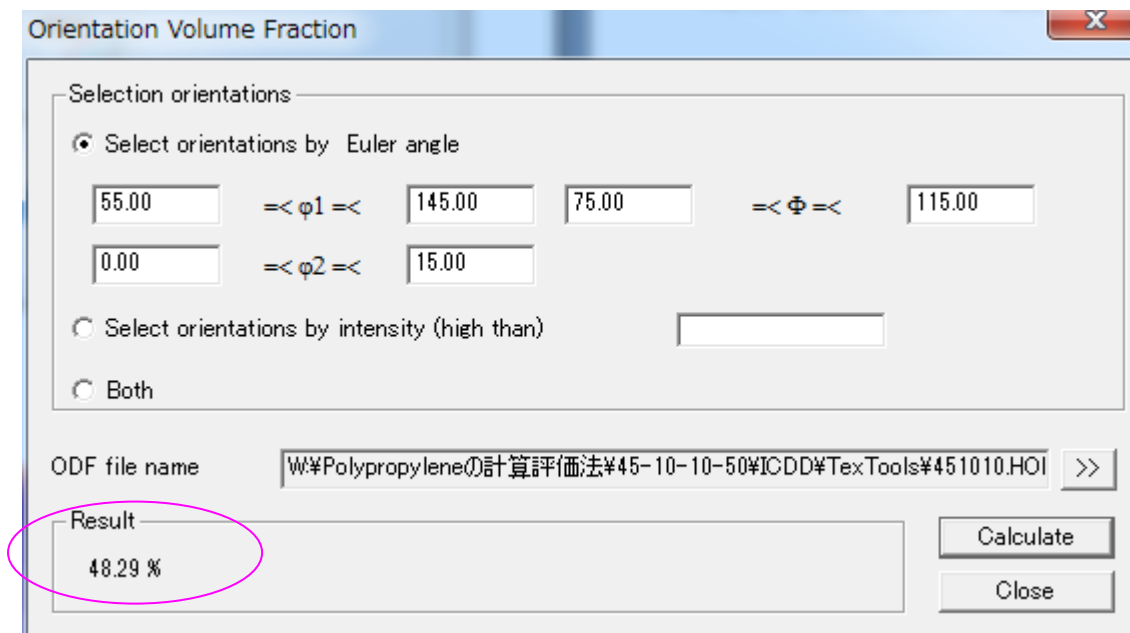
6.5 (1.0)
6.63 (1.02)
20.78 (3.1969)
90.0
90.0
80.5
1.54056
145

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
0	-1	5	2.6	3.5075	25.372
0	0	6	10.8	3.4633	25.701
1	-1	4	2.8	3.2854	27.119
1	1	5	1.9	3.1986	27.869
2	0	1	1.5	3.168	28.145
0	-2	2	8.8	3.1188	28.598
1	2	1	1.6	3.0943	28.829
2	1	0	1.6	3.0866	28.903
2	0	2	6.5	3.063	29.13
1	2	2	0.2	2.9962	29.794

TexToolsによるVolume Fraction法
(45, 10, 10) の場合 (立方体)



Euler 角度の広がり指定 (ただし長方体)



TexTools の場合、広がり指定は手入力

配向関数評価評価

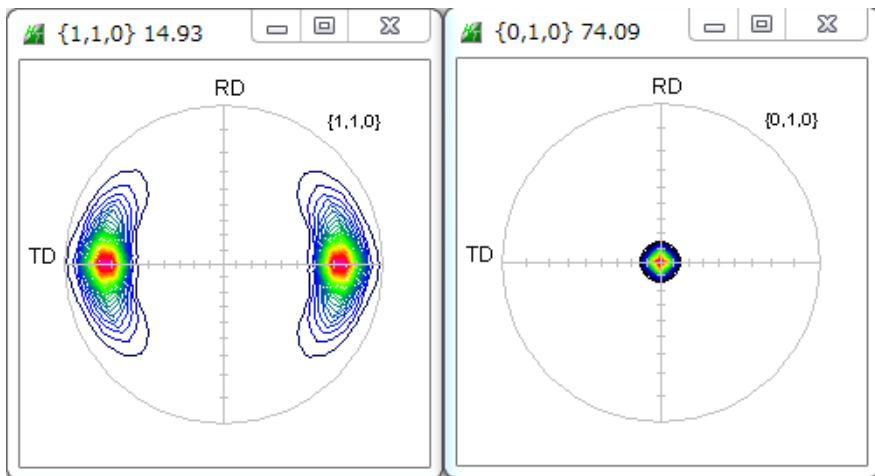
{1 1 0}、{0 4 0} 完全局点図から、a, b, c 軸方向から見た、ND, RD, TDを計算
 (0 1 0) [0 0 1] の広がり (1 0, 1 0, 1 0) の場合

The screenshot shows the PPOrientation 1.03X Free software interface. At the top, two pole figure windows are displayed: the left one for {1,1,0} with a value of 28.86, and the right one for {0,1,0} with a value of 75.25. Both plots show RD (Roll Direction) and TD (Transverse Direction) axes with contour plots of intensity. Below the plots is the main software window with a menu bar (File, Help, Orientation, PrintScreen) and a 'Select TXT2' section containing two file paths for {110} and {040}. A row of buttons includes PoleDisp, ContourDisp, {110}Orientation, {040}Orientation, and a highlighted Calc button. The 'Result' section contains a table with the following data:

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.2146	0.1715	0.6137	-0.1780	-0.2426	0.4206
{040}	0.6651	0.1674	0.1674	0.4976	-0.2488	-0.2488
a-axis	0.1700	0.1719	0.6579	-0.2448	-0.2420	0.4869
b-axis	0.6651	0.1674	0.1674	0.4976	-0.2488	-0.2488
c-axis	0.1648	0.6605	0.1746	-0.2527	0.4908	-0.2381

A 'ResultFile' button is located to the right of the table.

(0 1 0) [0 0 1] の広がり (45, 10, 10) の場合



PPOrientation 1.03X Free

File Help Orientation PrintScreen

Select TXT2

{110} W:\Polypropyleneの計算評価法\45-10-10-50\ICDD\110-45-10-10-50_labotexCW-rp_2.TXT

{040} W:\Polypropyleneの計算評価法\45-10-10-50\ICDD\040-45-10-10-50_labotexCW-rp_2.TXT

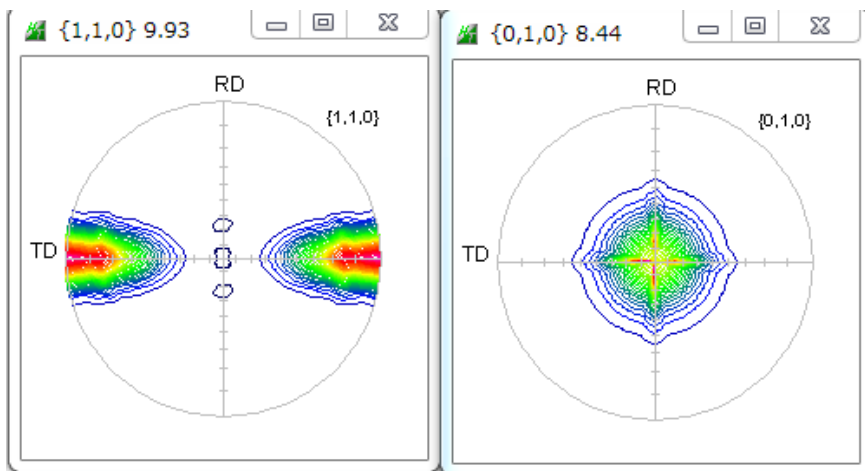
PoleDisp ContourDisp {110}Orientation {040}Orientation Calc

Result

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.2154	0.2009	0.5836	-0.1768	-0.1986	0.3755
{040}	0.6645	0.1677	0.1677	0.4968	-0.2484	-0.2484
a-axis	0.1709	0.2041	0.6248	-0.2435	-0.1937	0.4373
b-axis	0.6645	0.1677	0.1677	0.4968	-0.2484	-0.2484
c-axis	0.1645	0.6280	0.2074	-0.2532	0.4421	-0.1889

ResultFile

(0 1 0) [0 0 1] の広がり (1 0, 4 5, 1 0) の場合



PPOrientation 1.03X Free

File Help Orientation PrintScreen

Select TXT2

{110} W:\Polypropyleneの計算評価法\10-45-10-50\ICDD\110-10-45-10-50_labotexCW-rp_2.TXT

{040} W:\Polypropyleneの計算評価法\10-45-10-50\ICDD\040-10-45-10-50_labotexCW-rp_2.TXT

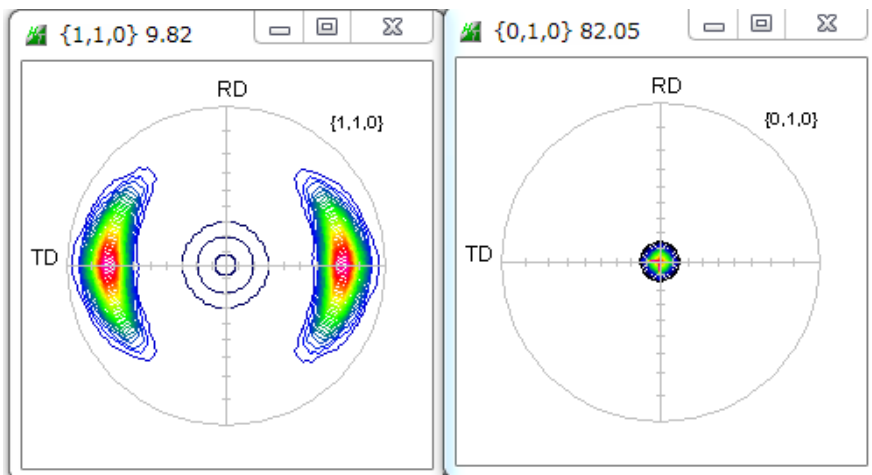
PoleDisp ContourDisp {110}Orientation {040}Orientation Calc

Result

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.2463	0.1761	0.5774	-0.1304	-0.2358	0.3662
{040}	0.5722	0.2138	0.2138	0.3584	-0.1792	-0.1792
a-axis	0.2141	0.1724	0.6134	-0.1788	-0.2414	0.4202
b-axis	0.5722	0.2138	0.2138	0.3584	-0.1792	-0.1792
c-axis	0.2136	0.6137	0.1726	-0.1795	0.4206	-0.2410

ResultFile

(0 1 0) [0 0 1] の広がり (1 0, 1 0, 4 5) の場合



PPOrientation 1.03X Free

File Help Orientation PrintScreen

Select TXT2

{110} W:\Polypropyleneの計算評価法\10-10-45-50\ICDD\110-10-10-45-50_labotexCW-rp_2.TXT

{040} W:\Polypropyleneの計算評価法\10-10-45-50\ICDD\040-10-10-45-50_labotexCW-rp_2.TXT

PoleDisp ContourDisp {110}Orientation {040}Orientation Calc

Result

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.2143	0.2111	0.5745	-0.1785	-0.1832	0.3617
{040}	0.6652	0.1673	0.1673	0.4979	-0.2489	-0.2489
a-axis	0.1696	0.2155	0.6148	-0.2454	-0.1767	0.4222
b-axis	0.6652	0.1673	0.1673	0.4979	-0.2489	-0.2489
c-axis	0.1650	0.6171	0.2178	-0.2524	0.4257	-0.1732

ResultFile

(010) [001] の Euler 角度の広がりによる配向関数 (同一 Volume Fraction)

(10,10,10)

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.2146	0.1715	0.6137	-0.1780	-0.2426	0.4206
{040}	0.6651	0.1674	0.1674	0.4976	-0.2488	-0.2488
a-axis	0.1700	0.1719	0.6579	-0.2448	-0.2420	0.4869
b-axis	0.6651	0.1674	0.1674	0.4976	-0.2488	-0.2488
c-axis	0.1648	0.6605	0.1746	-0.2527	0.4908	-0.2381

(45,10,10)

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.2154	0.2009	0.5836	-0.1768	-0.1986	0.3755
{040}	0.6645	0.1677	0.1677	0.4968	-0.2484	-0.2484
a-axis	0.1709	0.2041	0.6248	-0.2435	-0.1937	0.4373
b-axis	0.6645	0.1677	0.1677	0.4968	-0.2484	-0.2484
c-axis	0.1645	0.6280	0.2074	-0.2532	0.4421	-0.1889

(10,45,10)

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.2463	0.1761	0.5774	-0.1304	-0.2358	0.3662
{040}	0.5722	0.2138	0.2138	0.3584	-0.1792	-0.1792
a-axis	0.2141	0.1724	0.6134	-0.1788	-0.2414	0.4202
b-axis	0.5722	0.2138	0.2138	0.3584	-0.1792	-0.1792
c-axis	0.2136	0.6137	0.1726	-0.1795	0.4206	-0.2410

(10,10,45)

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.2143	0.2111	0.5745	-0.1785	-0.1832	0.3617
{040}	0.6652	0.1673	0.1673	0.4979	-0.2489	-0.2489
a-axis	0.1696	0.2155	0.6148	-0.2454	-0.1767	0.4222
b-axis	0.6652	0.1673	0.1673	0.4979	-0.2489	-0.2489
c-axis	0.1650	0.6171	0.2178	-0.2524	0.4257	-0.1732

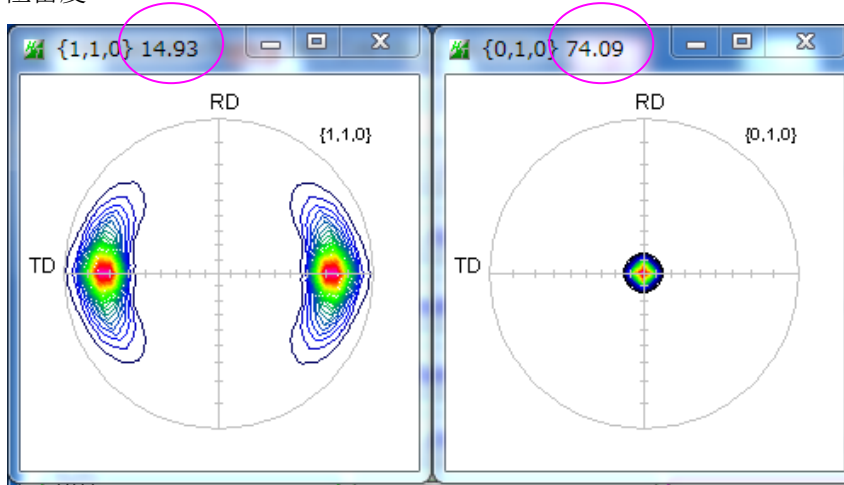
まとめ

材料特性に関する結晶方位を評価する場合、ODF解析による結晶方位解析は直接的で同一方位でも Euler 角度の広がりや定量値の数値化で分かり易い。

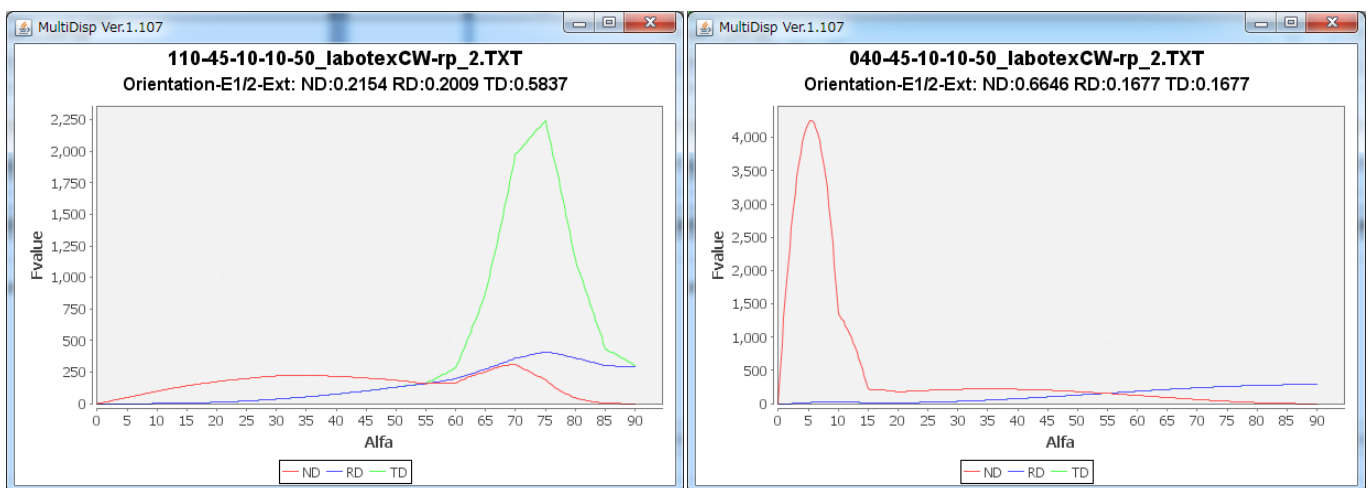
一方、配向関数では、方位の判別や方位の定量値が間接的で分かり難いが

解析した極点図、極密度、配向関数を列挙すれば、材料別の評価が可能になります。

極点図と極密度



入力極点図の配向関数



解析結果

PPOrientation 1.04Free

File Help PP&PE Orientation PrintScreen

Select TXT2

{110} W:\Polypropyleneの計算評価法\45-10-10-50\ICDD\110-45-10-10-50_labotexCW-rp_2.TXT

{040} W:\Polypropyleneの計算評価法\45-10-10-50\ICDD\040-45-10-10-50_labotexCW-rp_2.TXT

PoleDisp ContourDisp {110}Orientation {040}Orientation Calc

Result

direction	ND	RD	TD	frd	frd	ftd
{110}	0.2154	0.2009	0.5836	-0.1768	-0.1986	0.3755
{040}	0.6645	0.1677	0.1677	0.4968	-0.2484	-0.2484
a-axis	0.1709	0.2041	0.6248	-0.2435	-0.1937	0.4373
b-axis	0.6645	0.1677	0.1677	0.4968	-0.2484	-0.2484
c-axis	0.1645	0.6280	0.2074	-0.2532	0.4421	-0.1889

ResultFile