

MTEXによるポリプロピレンの解析

2018年02月13日

HelperTex Office

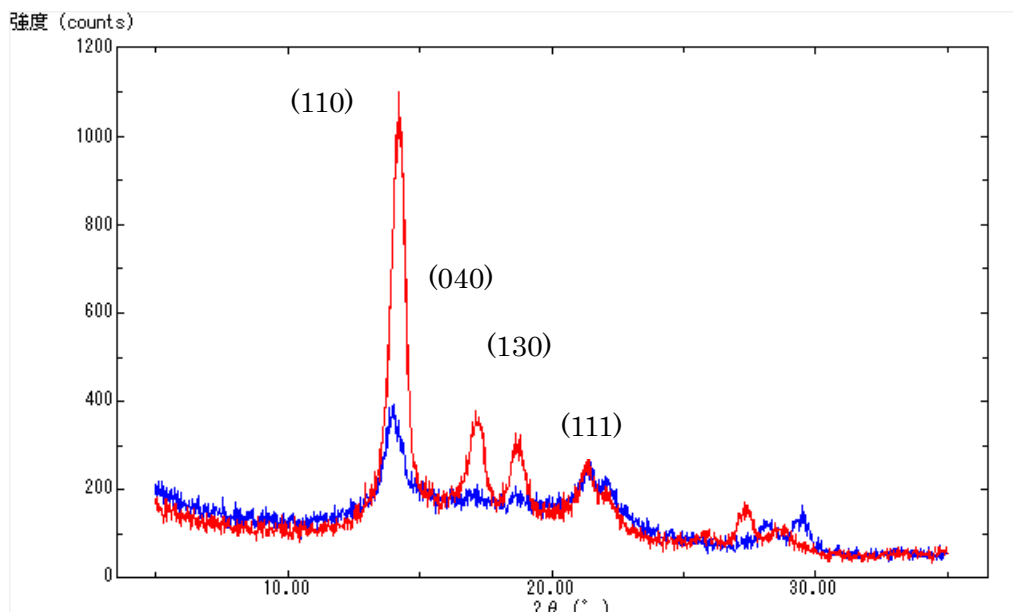
概要

ポリプロピレンは代表的な高分子材料であり、各種解析が行われている。
今回のMTEXは、フリーのODF解析ソフトウェアでありその実力評価の為、解析を行って見ます。
扱いやすいソフトウェアである事が分かります。

評価

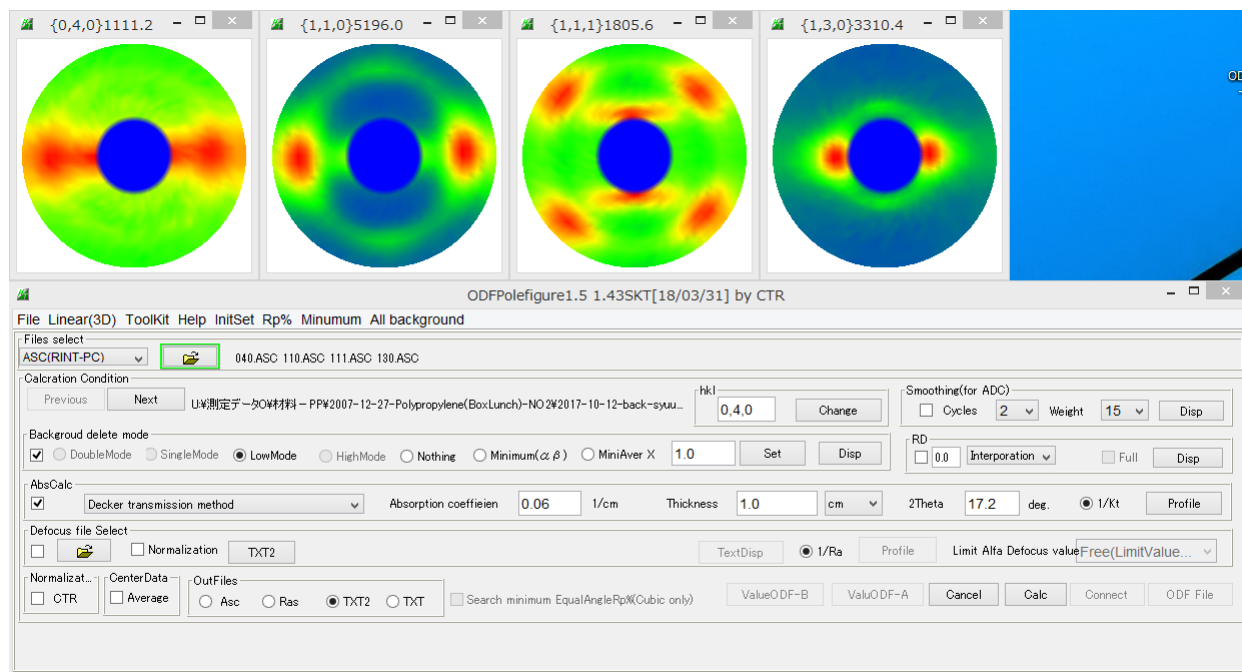
- 測定データの評価
- 吸収補正+疑似規格化
- MTEXに読み込み
- ODF解析
- 解析結果の評価
- 配向関数評価

Profileデータ

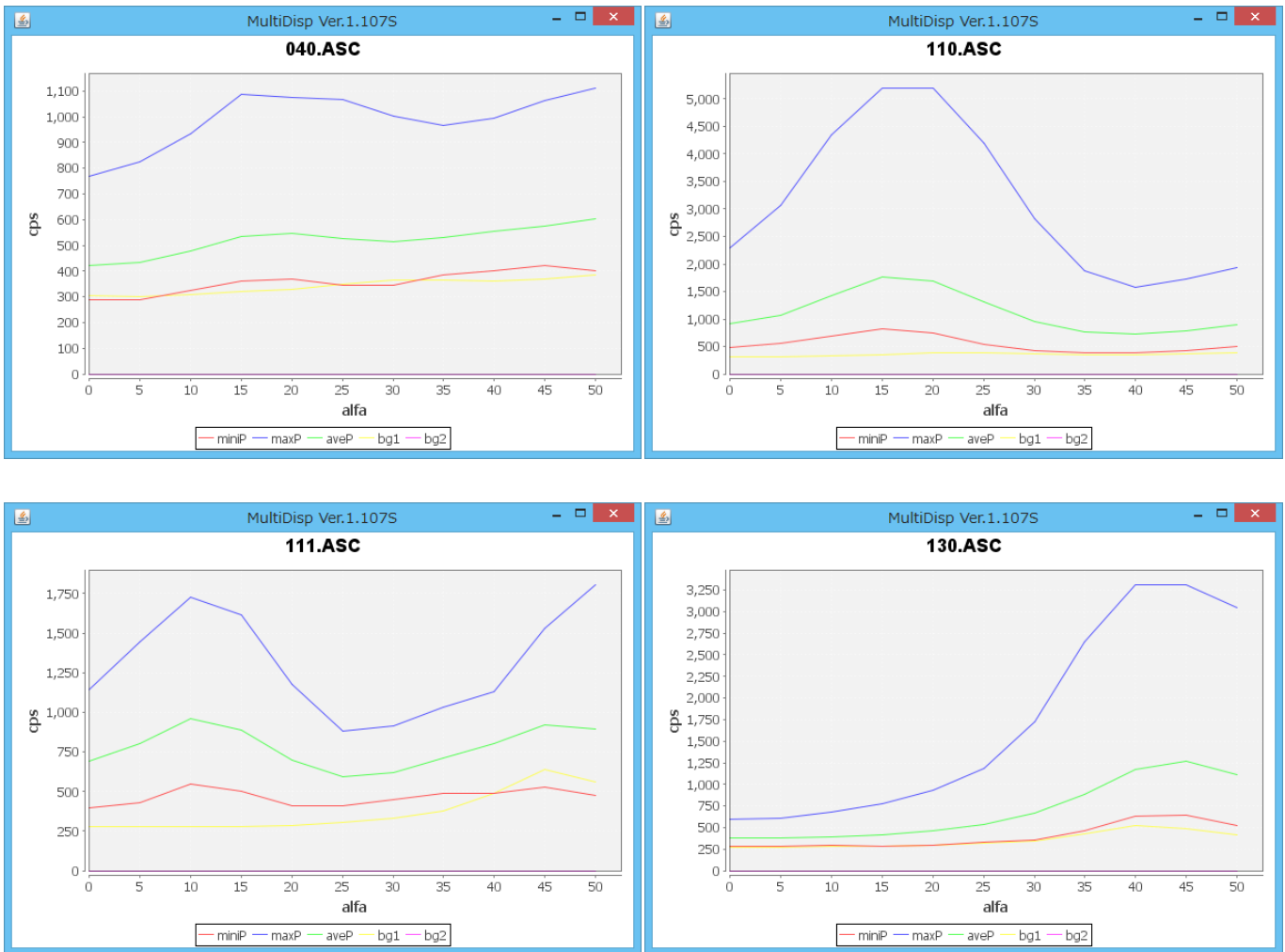


赤：MT 青：90度回転

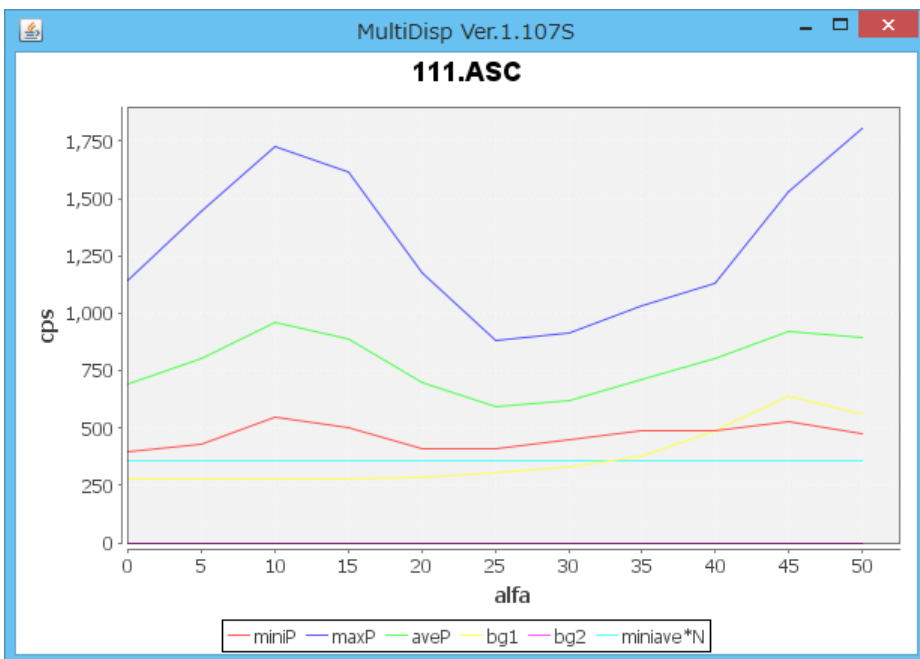
測定データ



測定データの評価

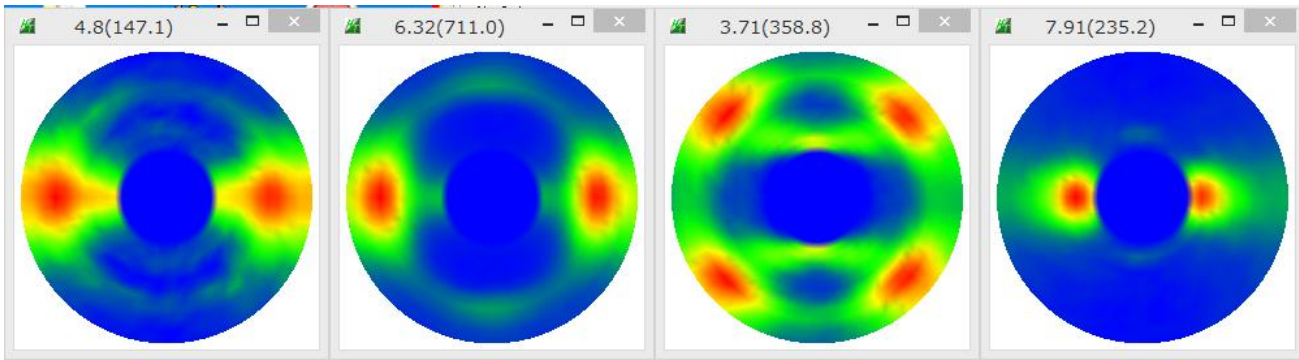


{ 1 1 1 } 極点図の α 角度 40 → 50 度で一たがピークデータの最小値をオーバしている
この修正を行う



黄色のバックグラウンドを水色に変更

R D補正(-2.5deg)、バックグラウンド削除、吸収補正(ut=0.06)、疑似規格化した極点図



M T E X 入カデータ作成

PFToODF3 8.33SKT[18/03/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material α -Polypropylene.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 2 - C2 (monoclinic)

a 1.0 <=b 3.1342 <=c 0.9804 alpha 90.0 beta 99.5 gamma 90.0

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
040_chB2US_2.TXT	0,4,0	17.2	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
110_chB2US_2.TXT	1,1,0	14.18	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
111_chB7US_2.TXT	1,1,1	21.32	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
130_chB2US_2.TXT	1,3,0	18.6	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>

M T E X に読み込み (Monoclinicとして計算)

Import Wizard

Crystal Reference Frame

Crystal Symmetry

Mineral

Indexed Not Indexed

mineral name Load Cif File

plotting color light blue

Crystal Coordinate System

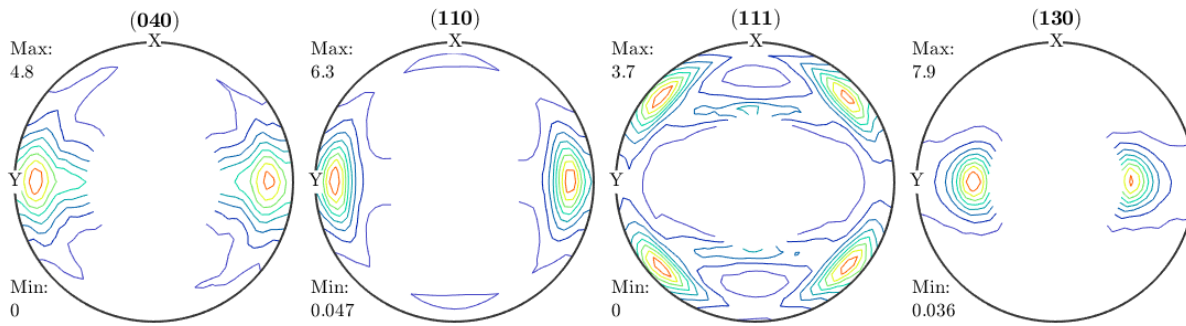
Point Group 2/m11 X||a Y||b

Axis Length a 6.63 b 20.78 c 6.5

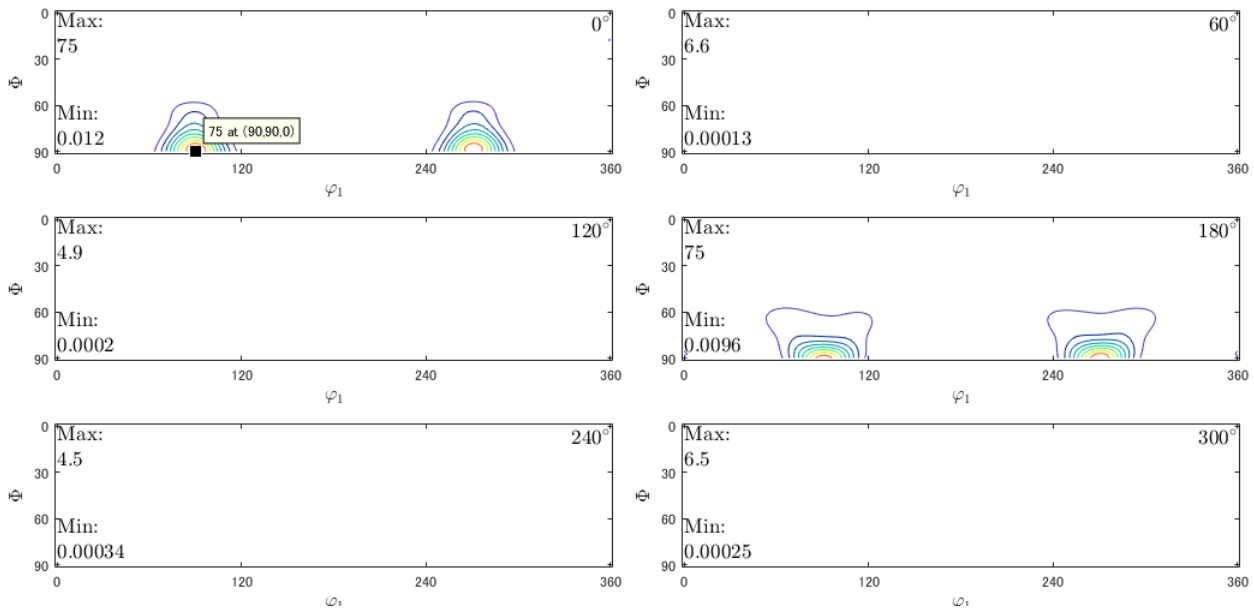
Axis Angle alpha 90 beta 99.5 gamma 90

Plot << Previous Next >> Finish

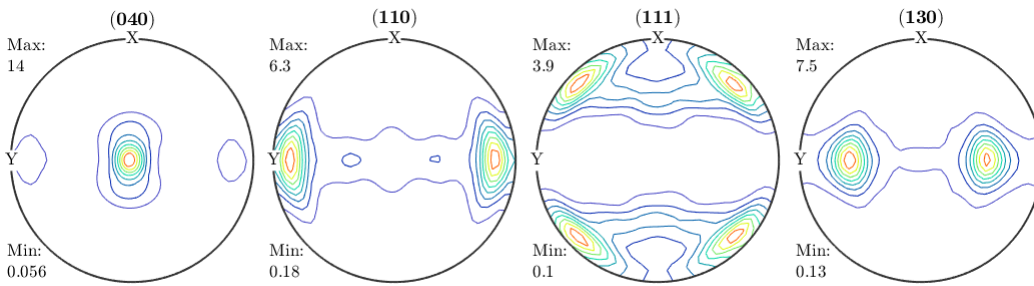
MT E Xに読み込まれた極点図



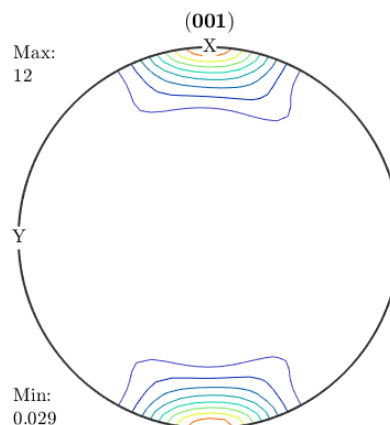
解析されたODF図($\phi_2 = 5$ 度間隔でも出力可能)



再計算極点図

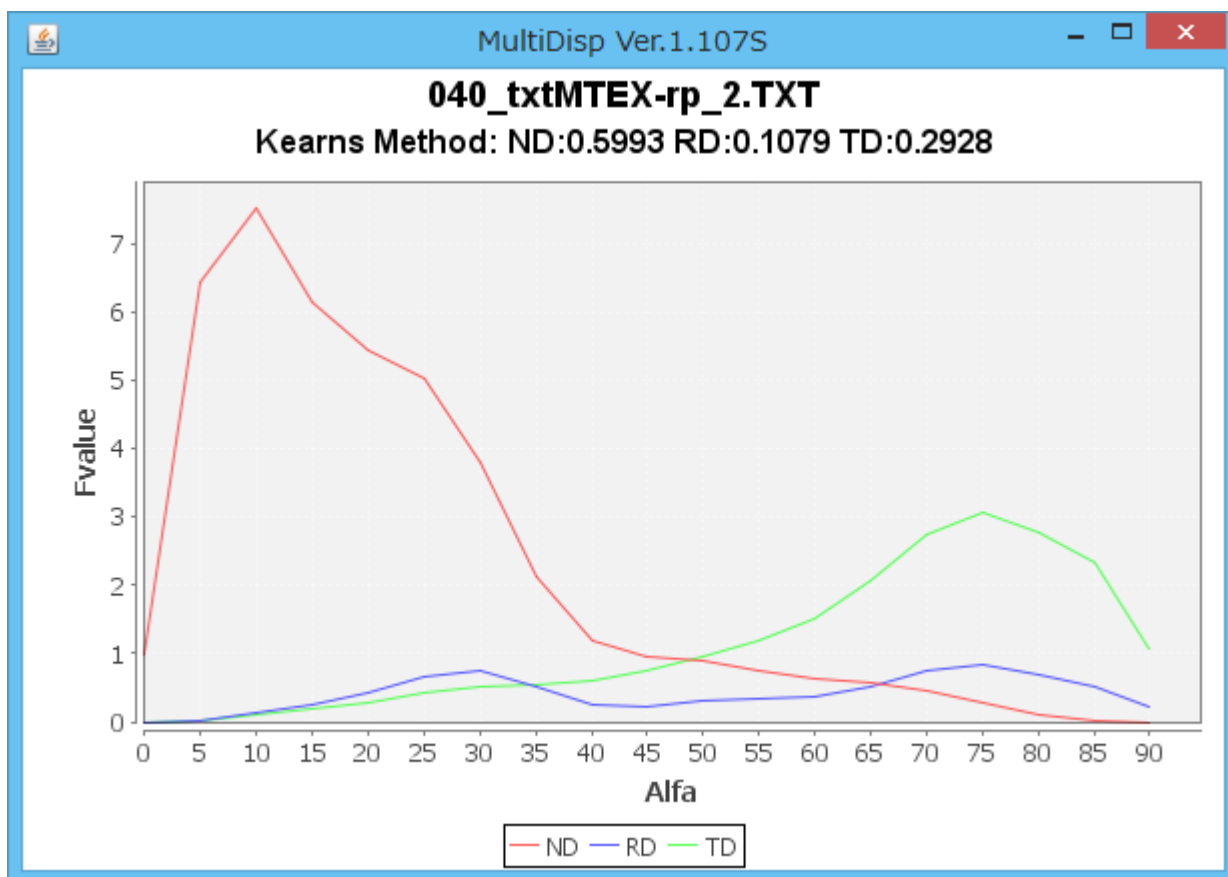
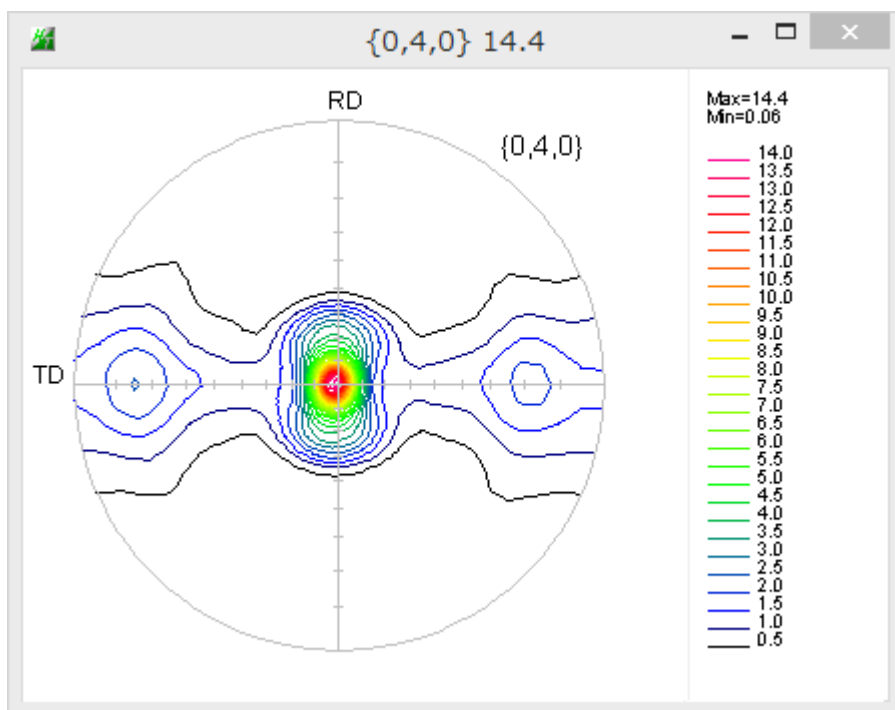


Euler角度 (90, 90, 0) が最大方位密度あり、{010} 極点図の中心に極があるので {010} <001>の可能性が高い。{001} 極点図を計算



plot(calcPoleFigure(odf,[Miller(0,0,1,CS)]),'contour')

{0 1 0} 極点図から配向関数を計算



b 軸方向への集積が計算出来ます。