

Polypropyleneの配向

1軸配向Polypropyleneの配向を調べる
配向度、配向分布関数、配向関数、ODFの特徴

2014年10月23日

2016年06月14日,多軸配向材料の配向関数算出

HelperTex Office

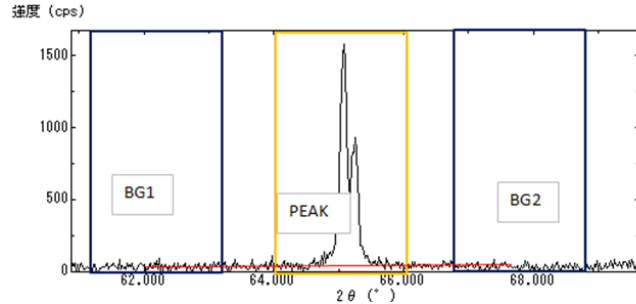
山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

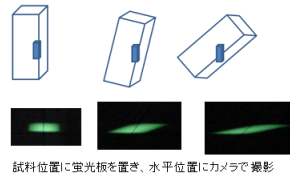
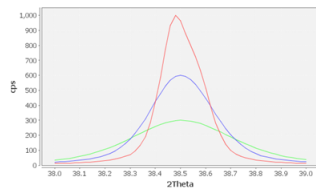
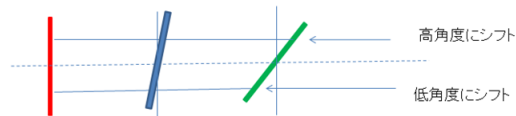
極点図の補正

透過法極点図の補正、バックグラウンド補正、吸収補正
反射法極点図の補正、バックグラウンド補正, defocus(吸収を含む)補正

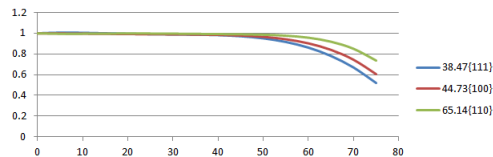
実測定バックグラウンド強度からピーク正味積分強度を算出(PEAKとBGを測定する)



Defocus(測定 2θ と受光スリット幅に影響される)



試料位置に蛍光板を置き、水平位置にカメラで撮影



吸収補正

吸収係数が小さいと、回折に寄与する体積に関係してきます。
極点図の内側で補正量が大きく成ります

極点図の外周のみで計算する配向度、配向分布関数はdefocus補正不要
完全極点図から計算する配向関数は、defocus補正が必要です。
透過極点と反射極点を使う場合、データの繋ぎは慎重に計算確認して下さい
ODF解析では、透過法極点図のみで計算する場合、defocus補正は不要

配向評価法

配向度 (CTR/PreferredOrientationソフトウェア)

極点図の外周データから半価幅率を計算

1軸配向材料の配向状態評価

$$\text{配向度: } A(\%) = \frac{360 - \sum W_i}{360} \times 100 (W: \text{度})$$

配向分布関数 (FiberSimpleOrientation)

極点図{110}、{040}の外周データから計算

1軸配向材料の軸配向評価(平行、垂直)

$$\langle \cos^2 \phi_{e,z} \rangle = 1 - 1.10 \langle \cos^2 \phi_{110,z} \rangle - 0.90 \langle \cos^2 \phi_{040,z} \rangle$$

配向関数 (Orientation(完全極点図), NDOrientation(不完全極点図))

極点図{040}の完全極点図から計算

ND, TD, RD方向に対する評価

$$\frac{\int_0^{90} \int_0^{360} I_c(\alpha, \beta) \cdot \sin^2 \alpha \cdot \cos \alpha \cdot d\beta \cdot d\alpha}{\int_0^{90} \int_0^{360} I_c(\alpha, \beta) \cdot \cos \alpha \cdot d\beta \cdot d\alpha}$$

配向関数 (Orientation(完全極点図) 2面による)

極点図{110}{040}の完全極点図から a, b, c軸方向のND,RD,TD配向評価

$$\langle \cos^2 \phi_{e,z} \rangle = 1 - 1.10 \langle \cos^2 \phi_{110,z} \rangle - 0.90 \langle \cos^2 \phi_{040,z} \rangle \quad \langle \cos^2 \phi_{040,z} \rangle = \frac{\int_0^{90} \int_0^{360} I_c(\alpha, \beta) \cdot \sin^2 \alpha \cdot \cos \alpha \cdot d\beta \cdot d\alpha}{\int_0^{90} \int_0^{360} I_c(\alpha, \beta) \cdot \cos \alpha \cdot d\beta \cdot d\alpha}$$

ODF解析 (LaboTex, TexTools, GPODFDisplay)

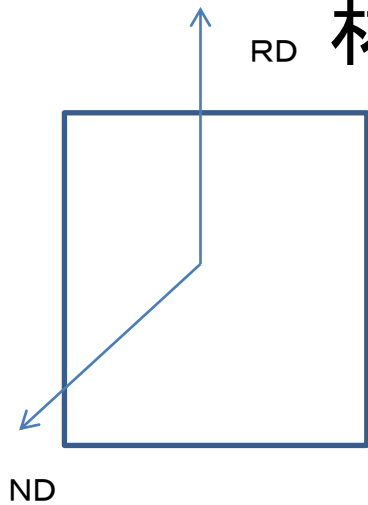
複数の極点図からODFを求め、VolumeFractionを得る

結晶方位[hkl] <uvw>の定量

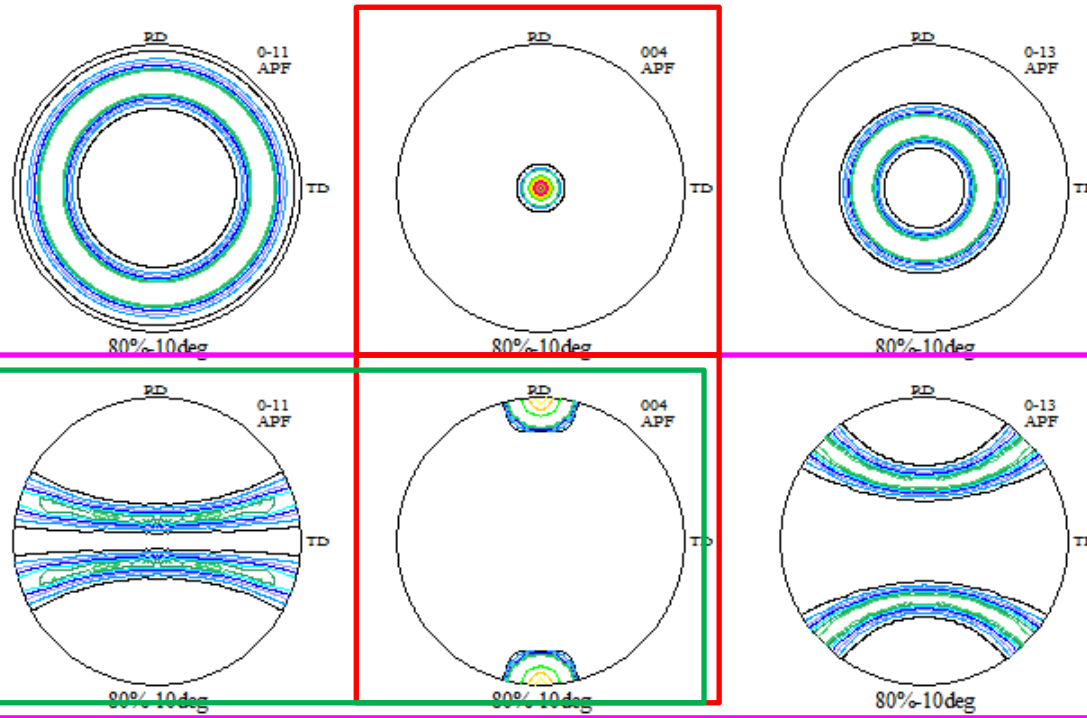
$$\frac{dV}{V} = f(g)dg \quad f^{n+1}(g) \sim f^n(g) \frac{\left[\frac{1}{\prod_{i=1}^{M_i} \left\{ \prod_{m_i=1}^{M_i} P_{h_i}(\mathbf{g}^{-1} \mathbf{h}_{m_i}) \right\}^{\frac{1}{M_i}}} \right]^{\frac{r}{i}}}{\left[\frac{1}{\prod_{i=1}^{M_i} \left\{ \prod_{m_i=1}^{M_i} P_{h_i}''(\mathbf{g}^{-1} \mathbf{h}_{m_i}) \right\}^{\frac{1}{M_i}}} \right]^{\frac{r}{i}}}$$

材料測定(測定方向による極点図)

RD方向(上段)とND方向(下段)の極点図測定



RD方向の極点図



ND方向の極点図

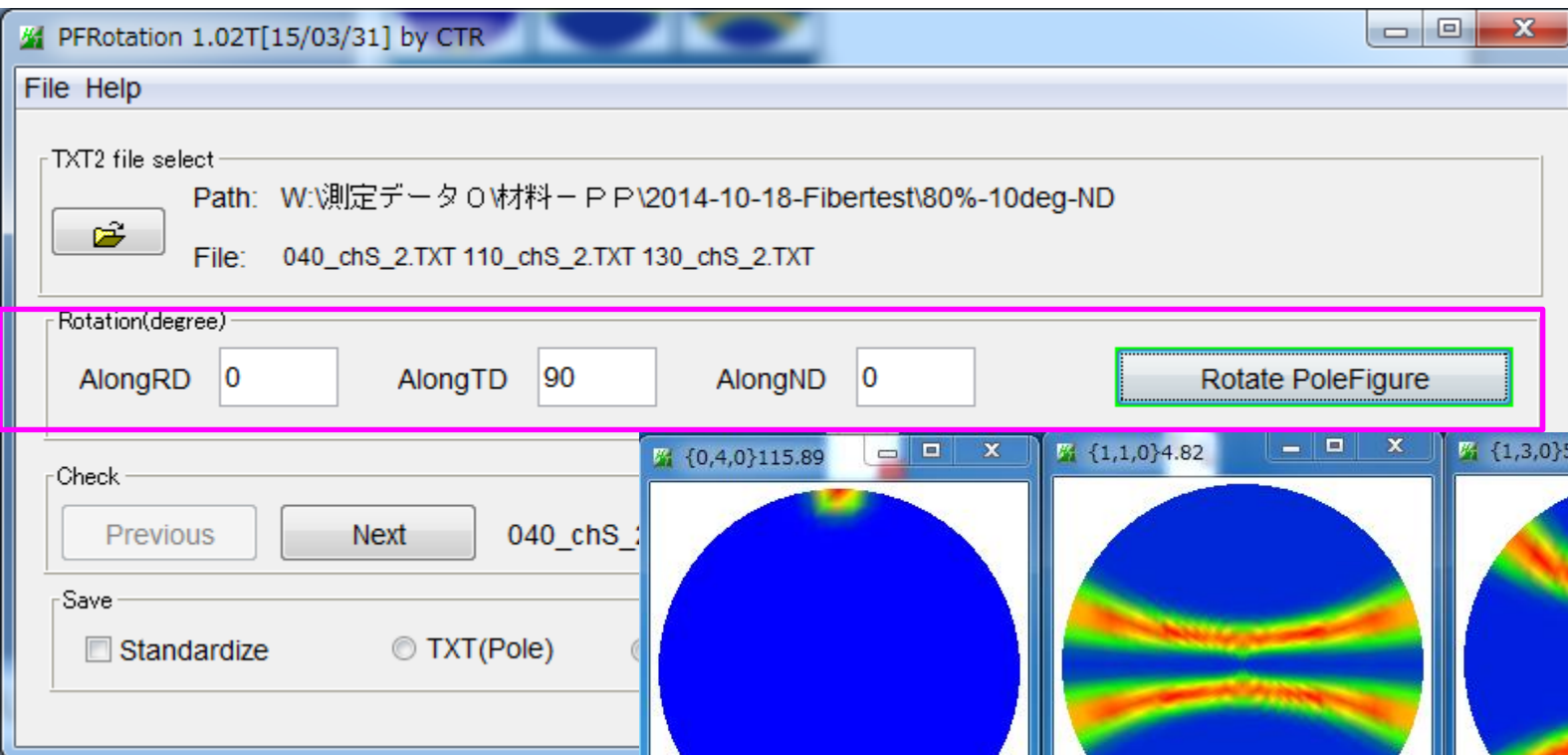
配向度で使う極点図(外周のみ)

配向関数で使う極点図(完全極点図(反射不完全))

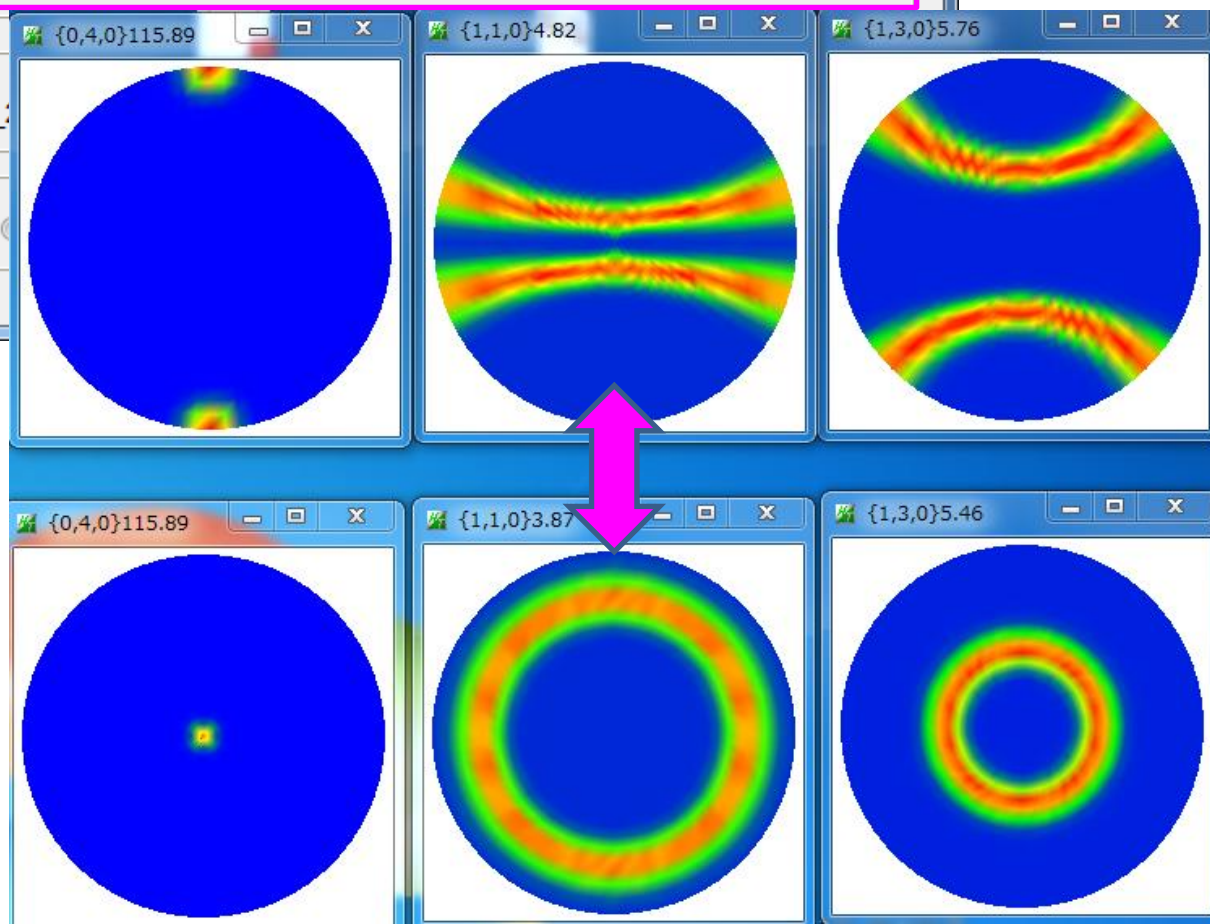
配向分布関数で使う極点図(外周のみ)

ODFは全ての極点図を対象としている

軸変換(PFRotation)



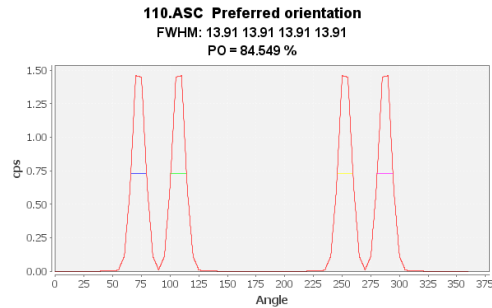
TD軸に対し90度回転



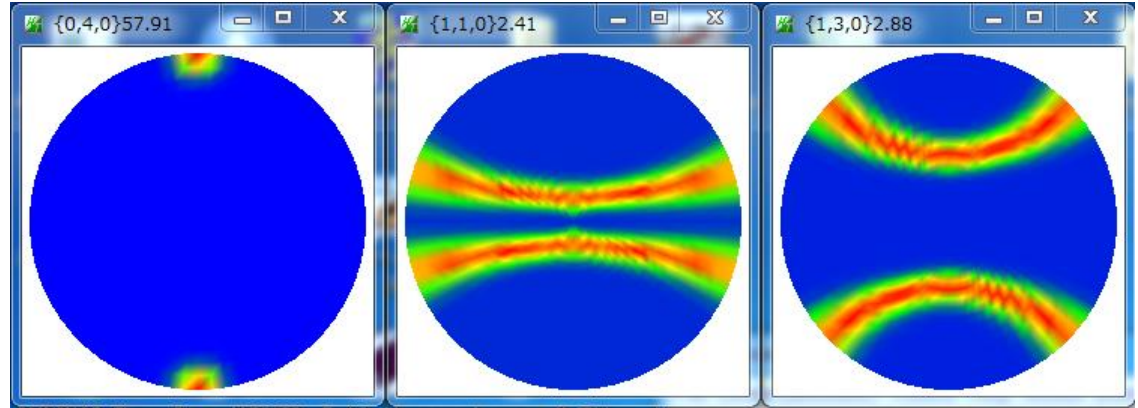
広がりが異なるデータの解析(配向度)極点図の外周から計算

VolumeFraction80%のeuler角度半価幅 10deg-20deg比較

80%-10deg、ND方向の極点図

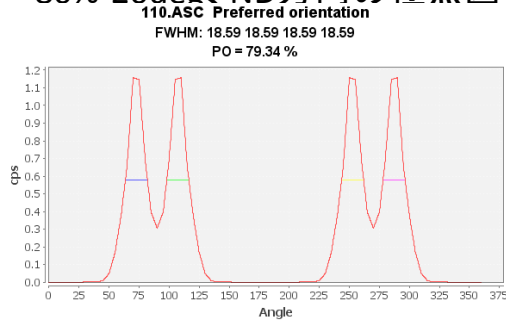


{110}の極点図

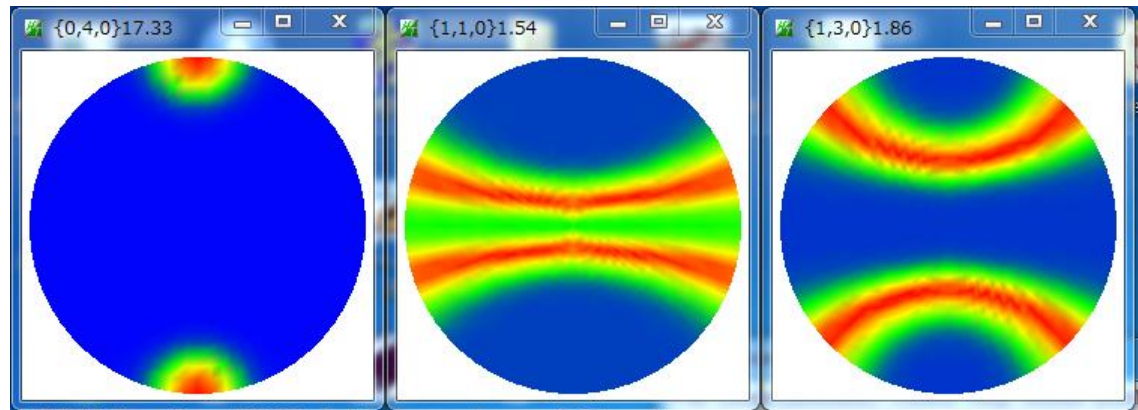


110.ASC Preferred orientation FWHM: 13.91 13.91 13.91 13.91 PO = 84.549 %
130.ASC Preferred orientation FWHM: 12.81 12.81 12.81 12.81 PO = 85.764 %

80%-20deg、ND方向の極点図



{110}の極点図



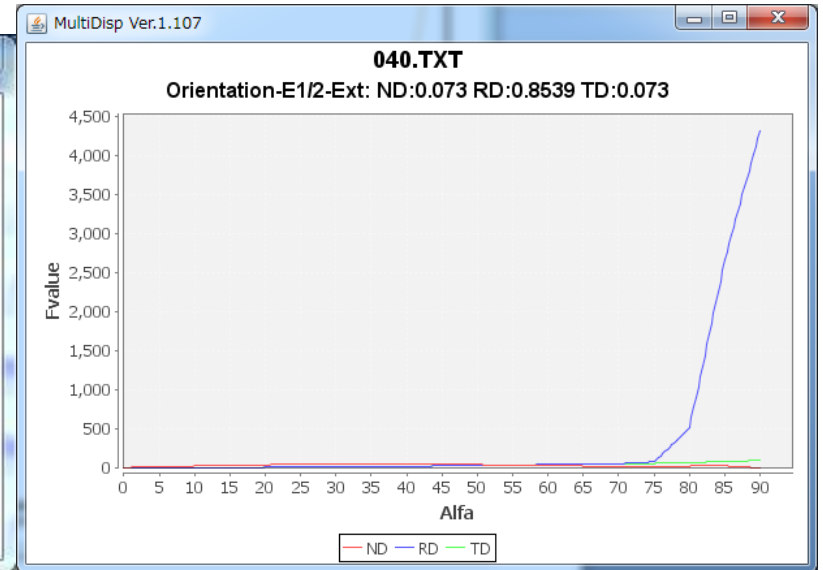
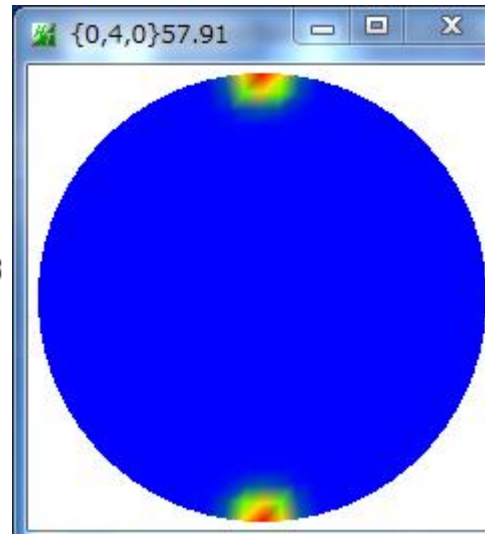
110.ASC Preferred orientation FWHM: 18.59 18.59 18.59 18.59 PO = 79.34 %
130.ASC Preferred orientation FWHM: 16.88 16.88 16.88 16.88 PO = 81.25 %

配向度では、分布の広がりが10degと20degで、積分幅で計算すると、84<—>77と計算される

広がりが異なるデータの解析(配向関数)完全極点図から計算

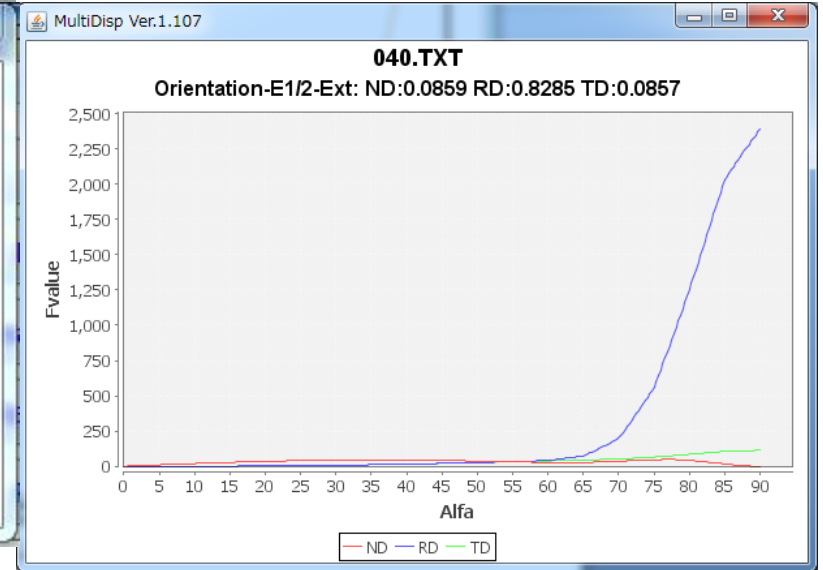
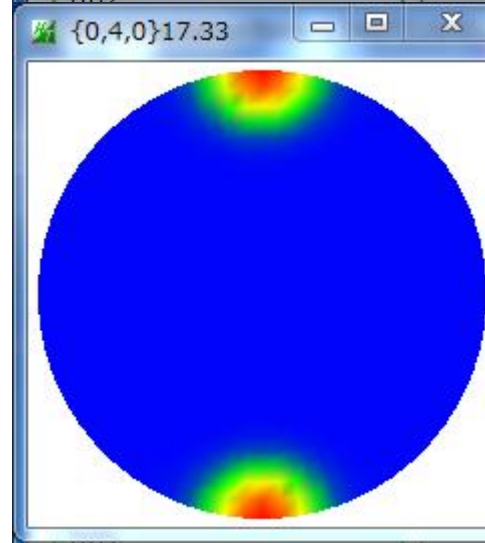
80%-10deg

ND:0.073 RD:0.8539 TD:0.073



80%-20deg

ND:0.0859 RD:0.8285 TD:0.0857

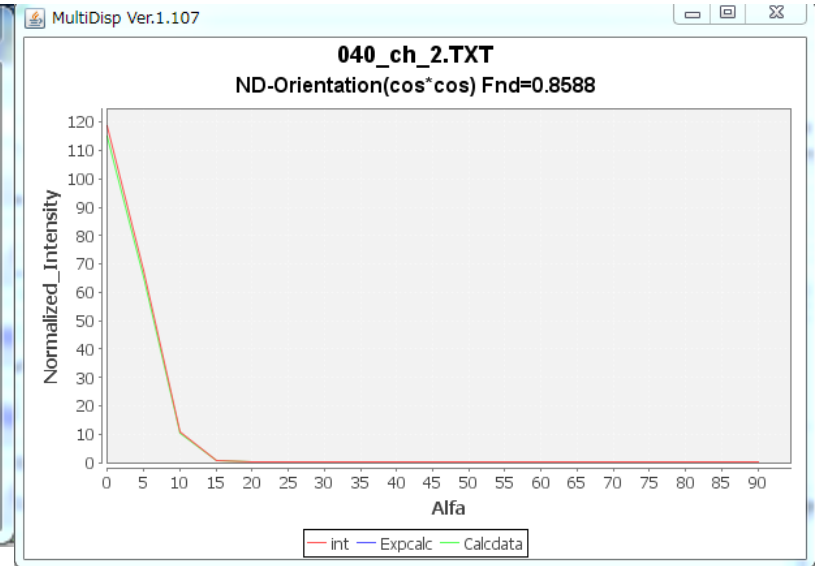
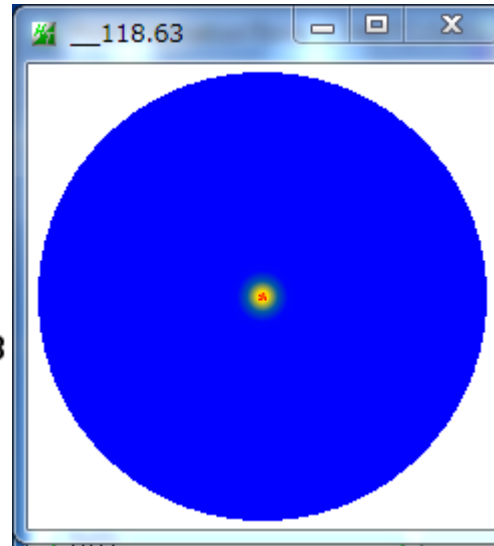


配向度関数では、分布の広がりが10degと20degで、RDが、0.8539<—>0.8285と計算される

広がりが異なるデータの解析(配向関数)不完全極点図から計算

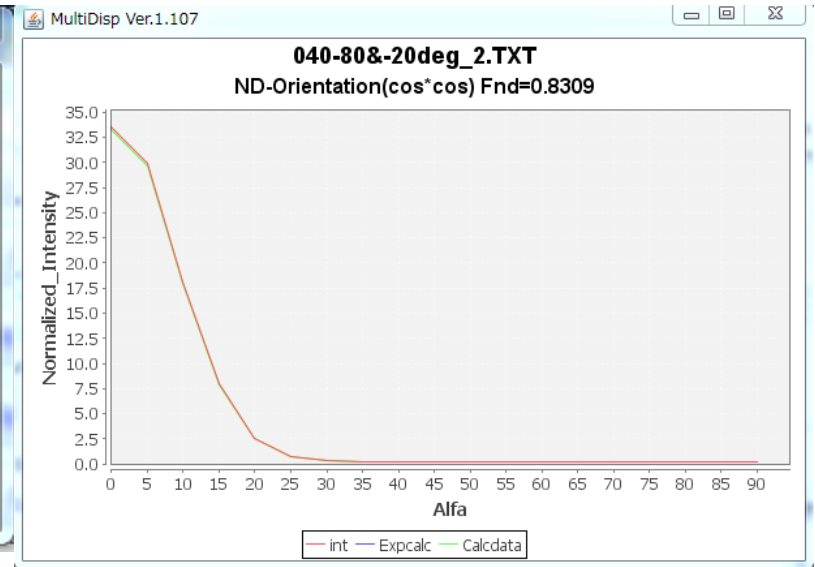
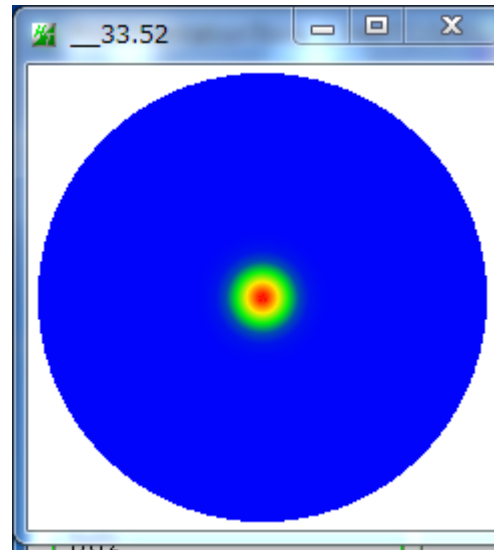
80%-10deg

ND-Orientation(cos*cos) Fnd=0.8588



80%-20deg

ND-Orientation(cos*cos) Fnd=0.8309

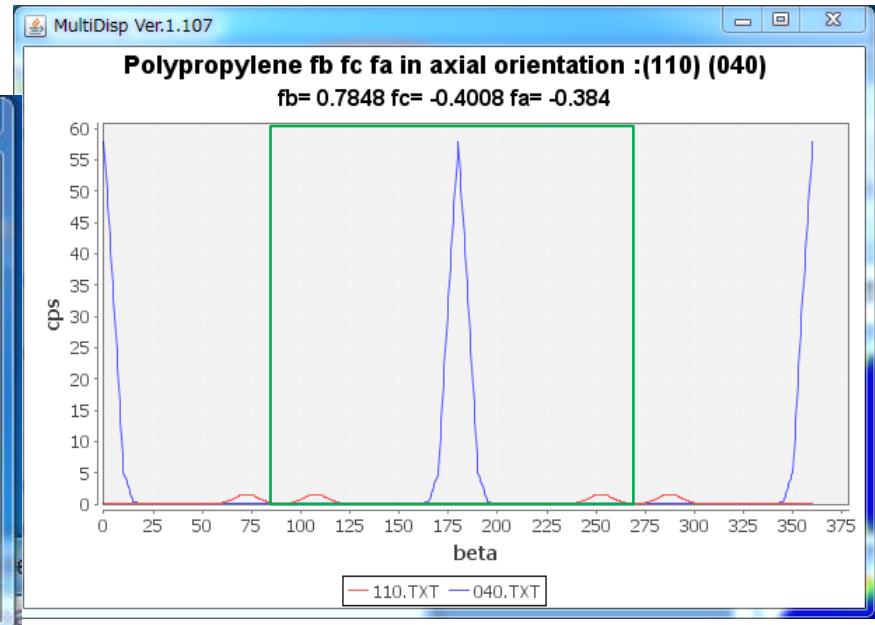
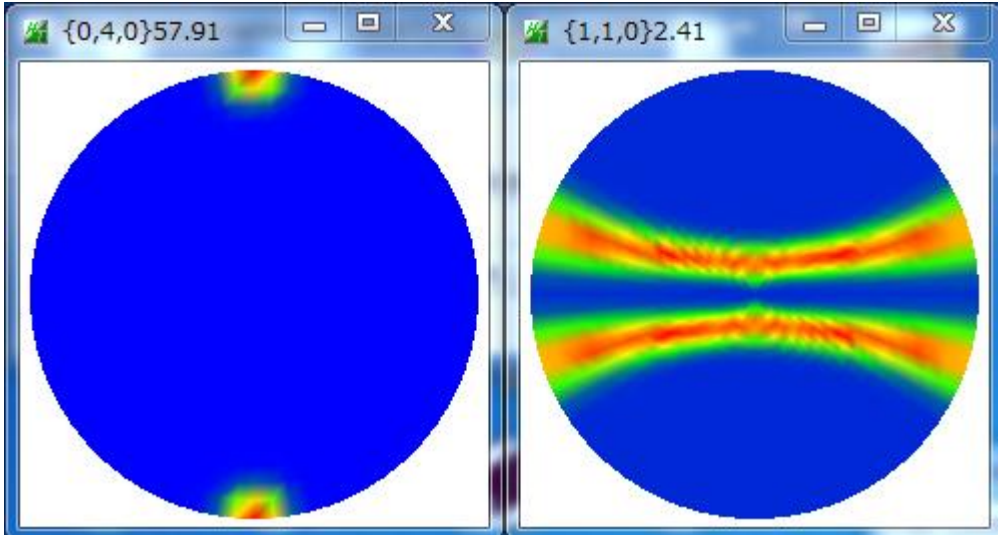


配向度関数では、分布の広がりが10degと20degで、RDが、0.8588<—>0.8309と計算される

広がりが異なるデータの解析(配向分布関数)極点図の外周の90->270から計算

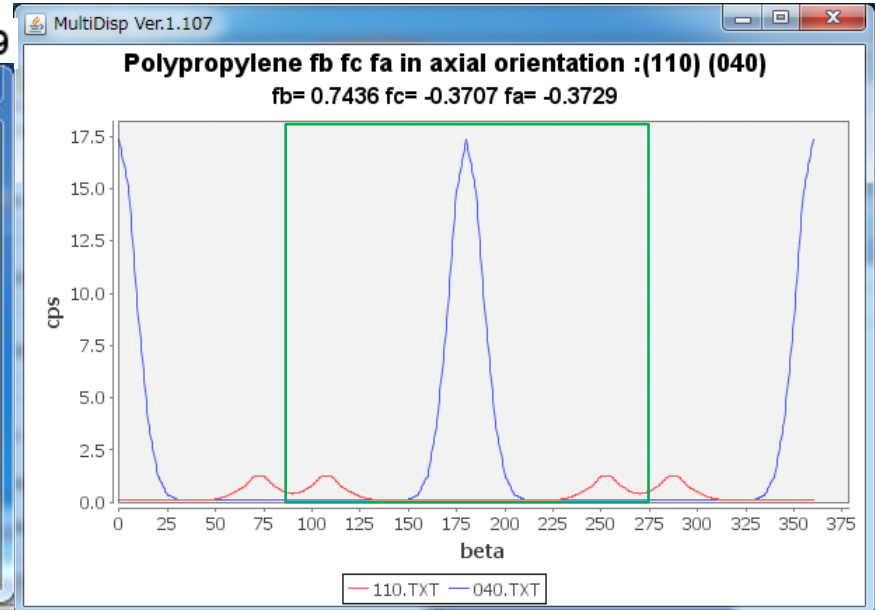
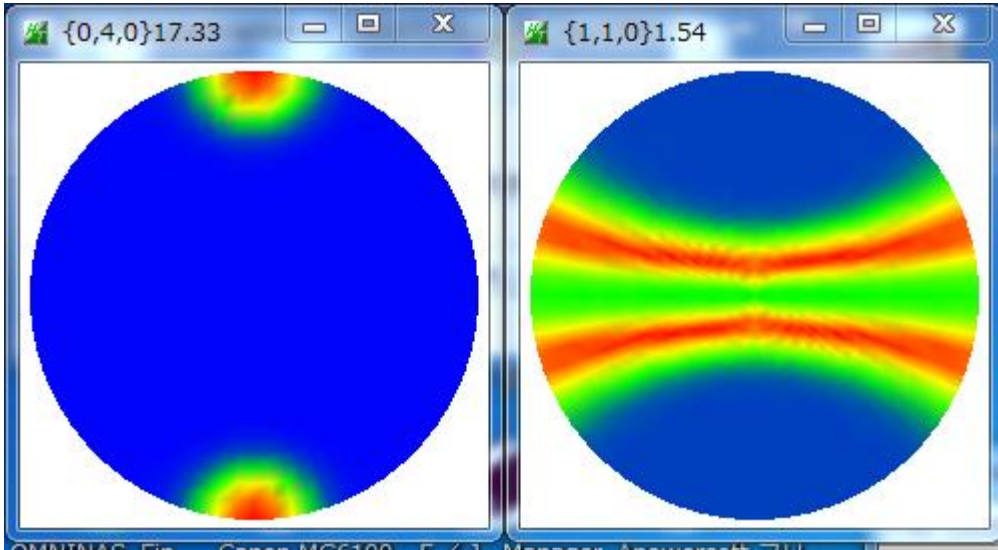
80%-10deg

fb= 0.7848 fc= -0.4008 fa= -0.384



80%-20deg

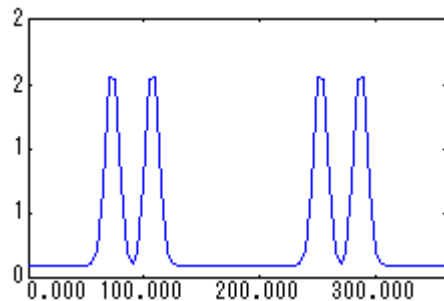
fb= 0.7436 fc= -0.3707 fa= -0.3729



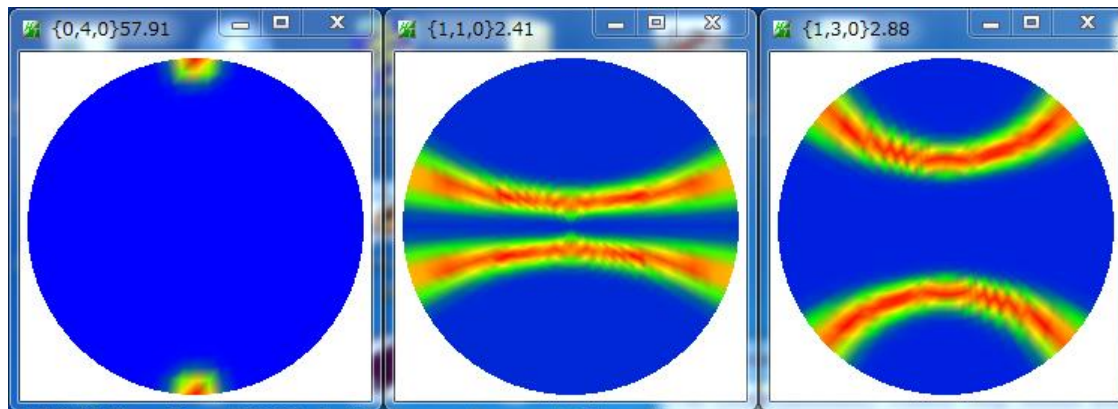
配向分布関数では、分布の広がりが10degと20degで、fbが、0.7848<->0.7436と計算される

VolumeFractionが異なるデータの解析(配向度)極点図の外周から計算

80%-10deg、ND方向の極点図

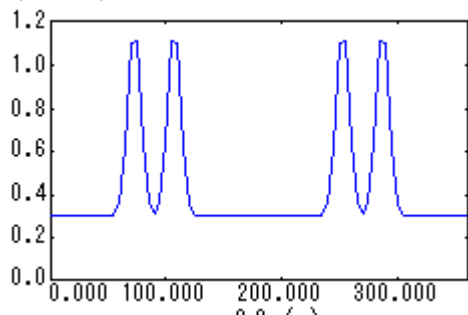


{110}の極点図

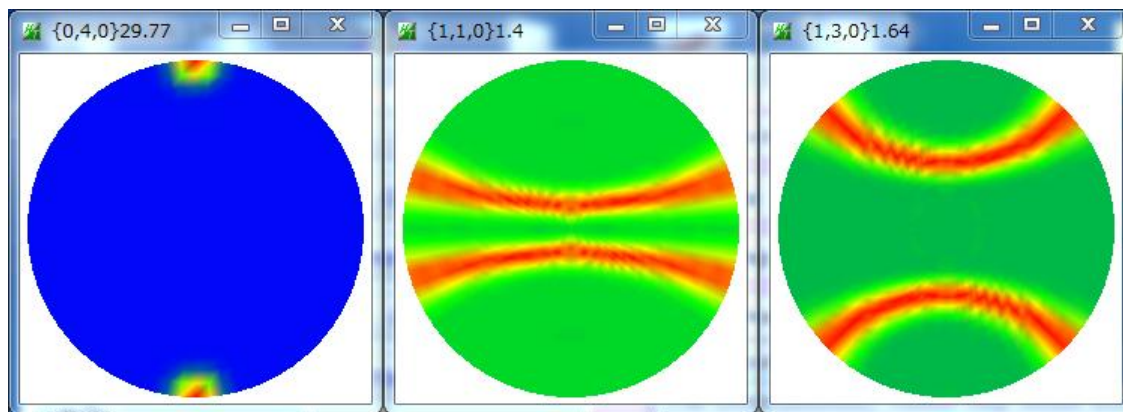


040.ASC Preferred orientation FWHM: 11.56 11.56 PO = 93.576 %
 110.ASC Preferred orientation FWHM: 13.91 13.91 13.91 13.91 PO = 84.549 %
 130.ASC Preferred orientation FWHM: 12.81 12.81 12.81 12.81 PO = 85.764 %

40%-10deg、ND方向の極点図



{110}の極点図



040.ASC Preferred orientation FWHM: 11.56 11.56 PO = 93.576 %
 110.ASC Preferred orientation FWHM: 13.59 13.59 13.59 13.59 PO = 84.896 %
 130.ASC Preferred orientation FWHM: 12.5 12.5 12.5 12.5 PO = 86.111 %

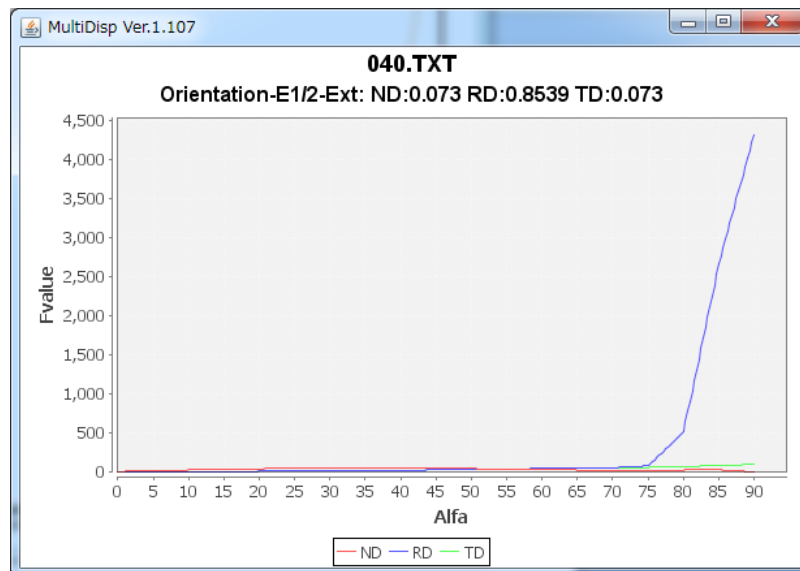
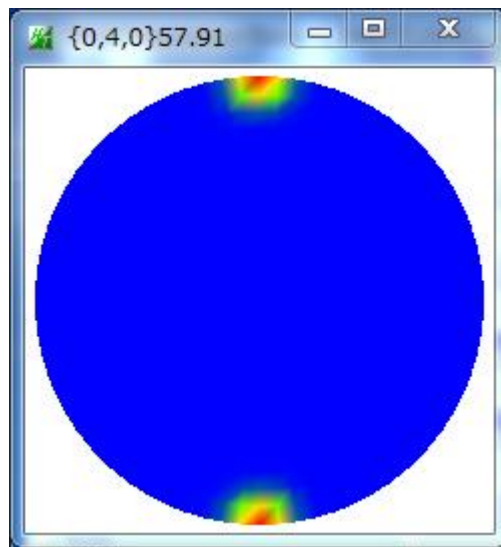
プロファイルが相似形の為、結果は同じしかし、PreferredOrientation(ver1.07)にて、バックグラウンドの扱い変更により評価が可能になった

詳しくは、PreferredOrientation説明書を参考にして下さい。2015/01/15

VolumeFractionが異なるデータの解析(配向関数)完全極点図から計算

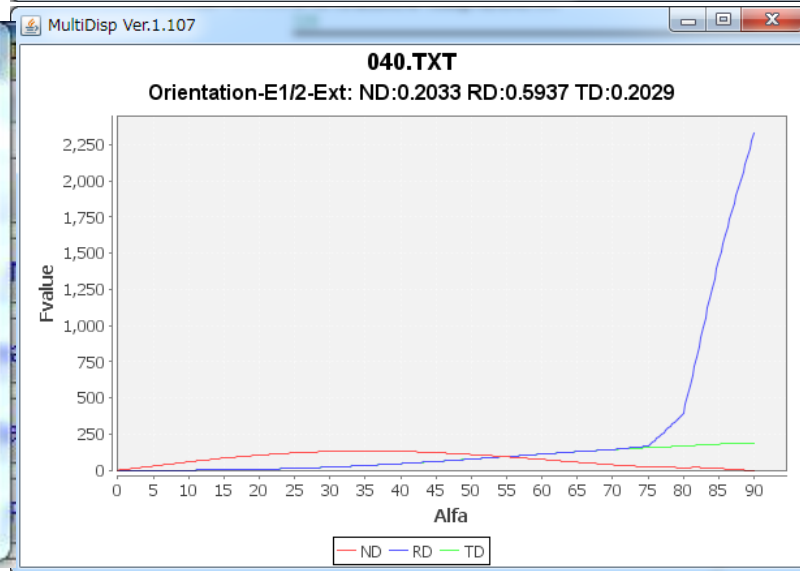
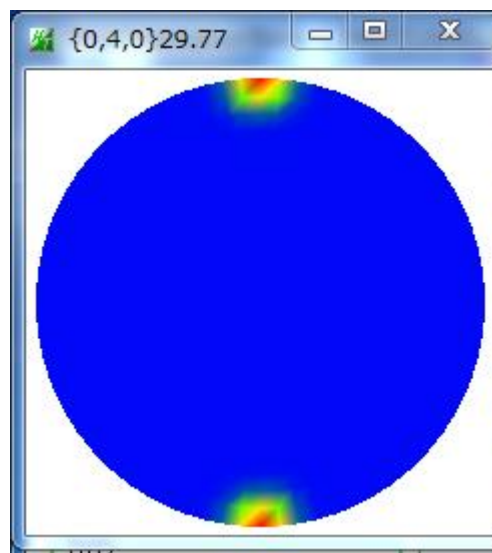
80%-10deg

ND:0.073 RD:0.8539 TD:0.073



40%-10deg

ND:0.2033 RD:0.5937 TD:0.2029

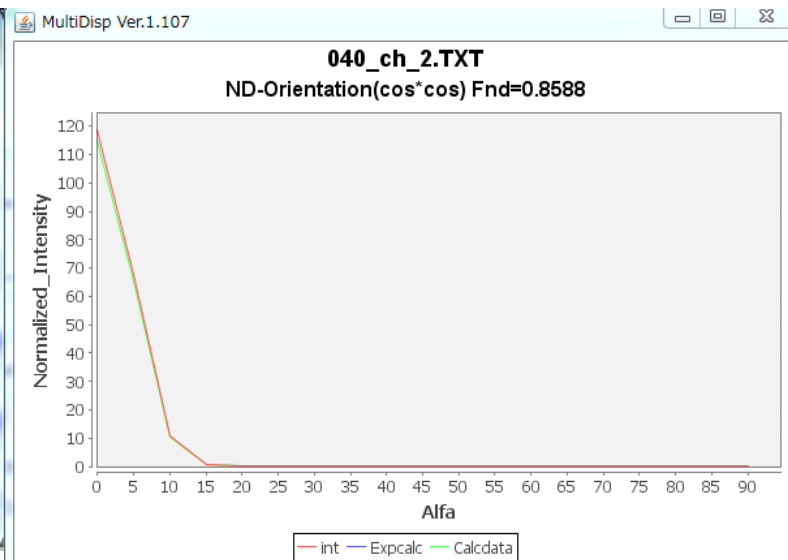
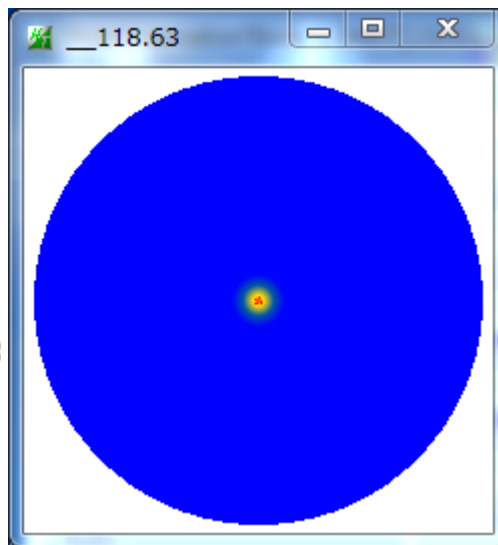


配向度関数では、VF%が80%と40%で、RDが、0.8539<—>0.5937と計算される

VolumeFractionが異なるデータの解析(配向関数)不完全極点図から計算

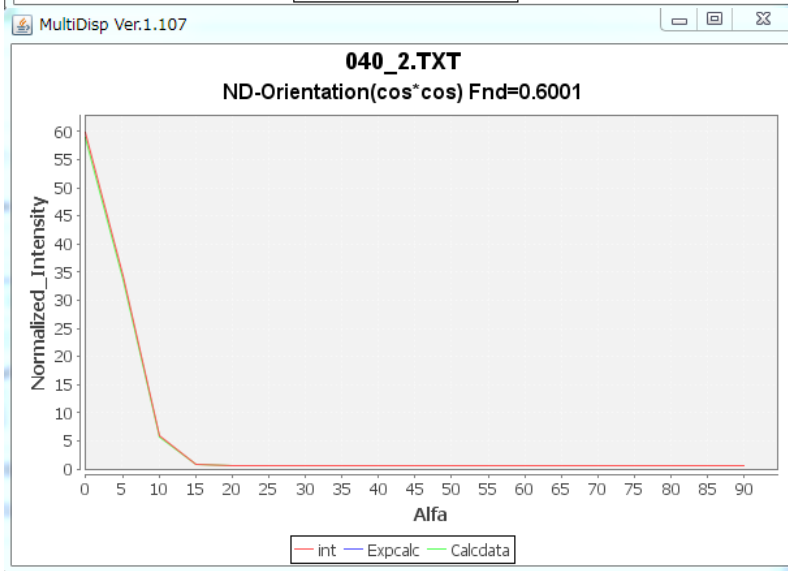
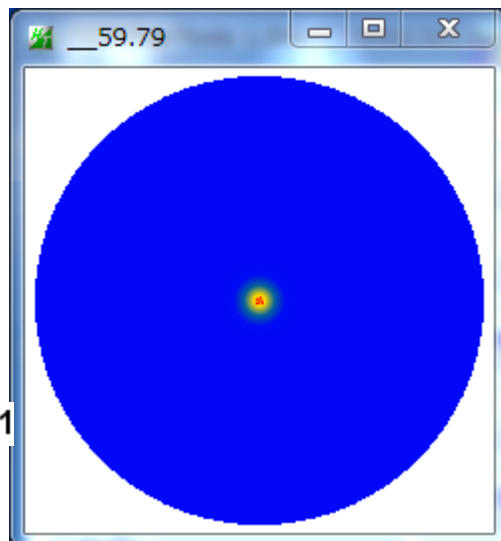
80%-10deg

ND-Orientation($\cos^*\cos$) Fnd=0.8588



40%-10deg

ND-Orientation($\cos^*\cos$) Fnd=0.6001

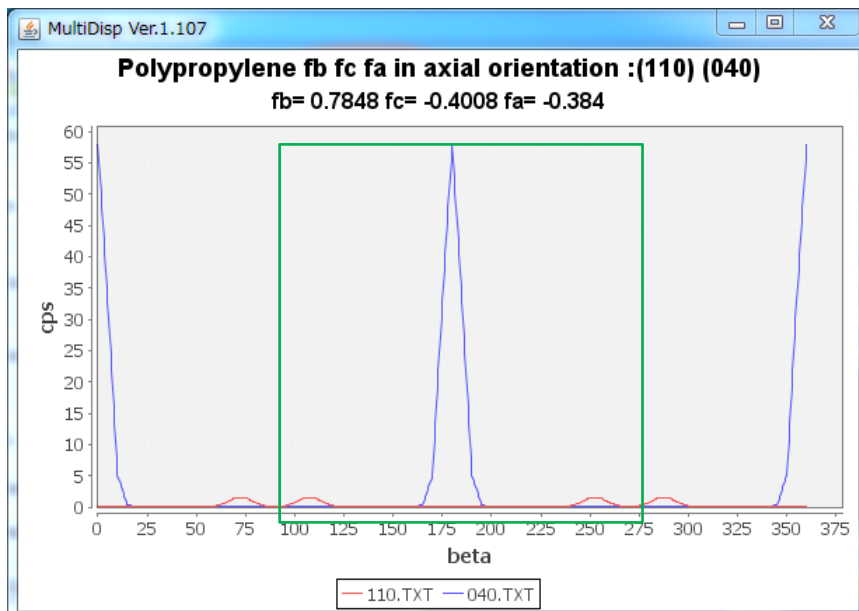
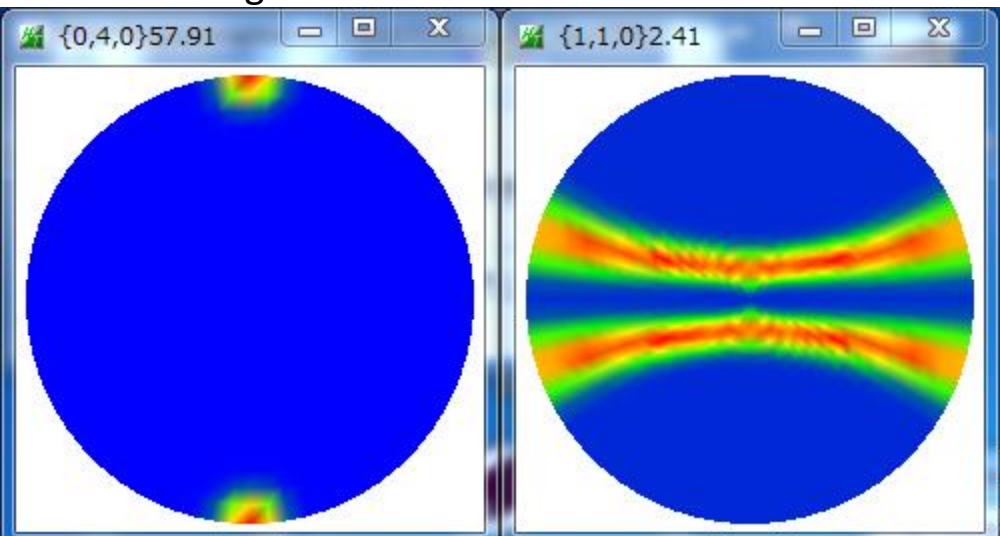


配向度関数では、VF%が80%と40%で、RDが、 $0.8539 < \rightarrow 0.5937$ と計算される

VolumeFraction異なるデータの解析(配向分布関数)極点図の外周の90->270から計算

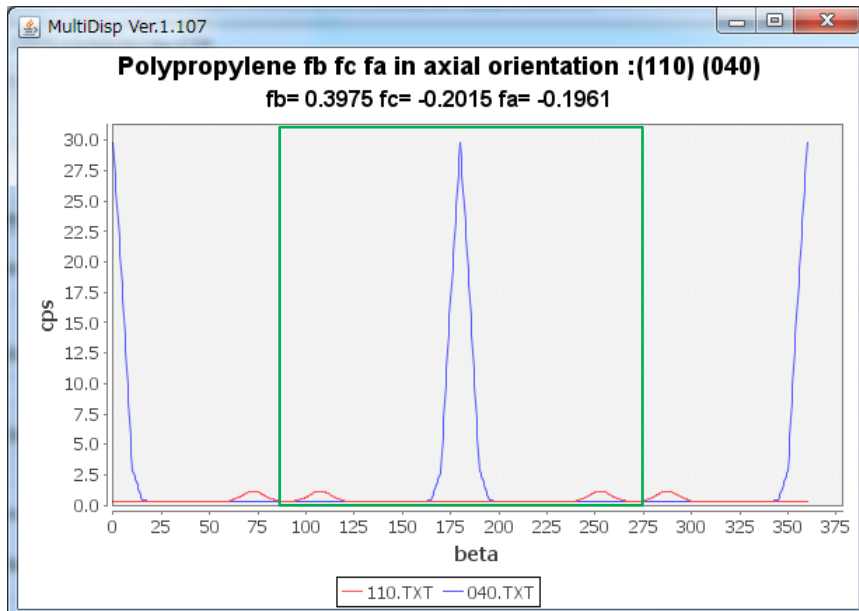
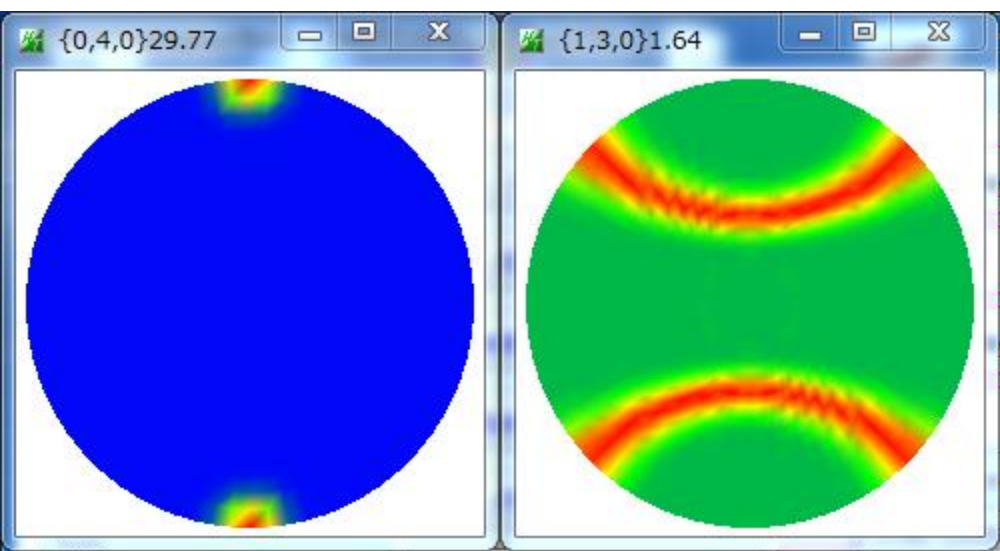
80%-10deg

fb= 0.7848 fc= -0.4008 fa= -0.384



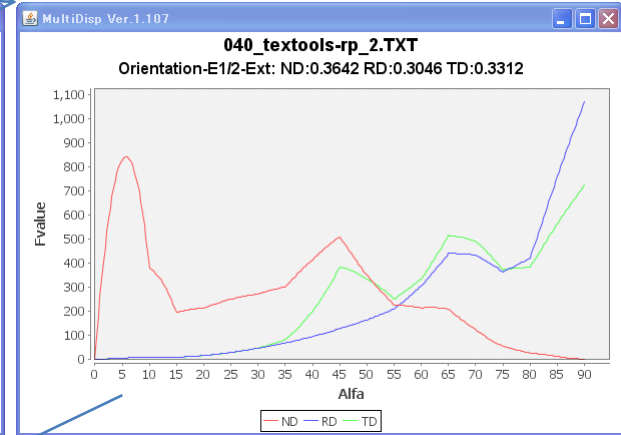
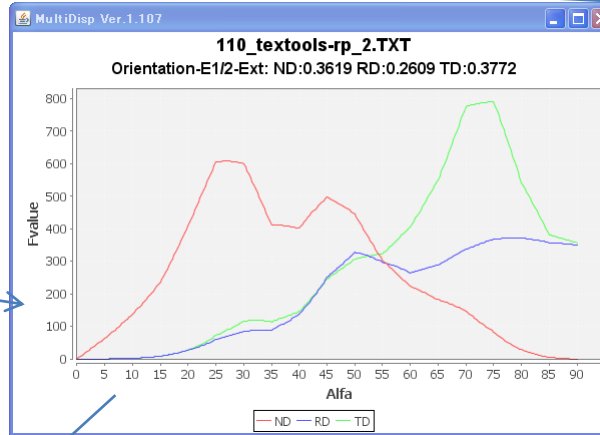
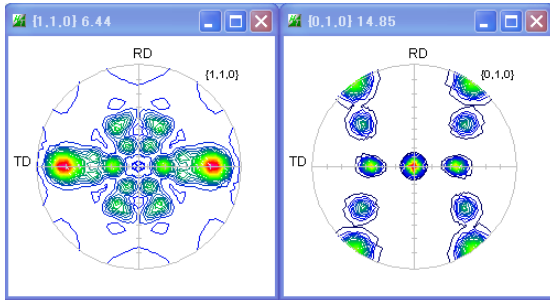
40%-10deg

fb= 0.3975 fc= -0.2015 fa= -0.1961



配向分布関数では、VF%が80%と40%は、0.7848<->0.3975と計算される

{110},{040}完全極点図から配向関数



PPOrientation 1.01X

File Help

Select TXT2

{110} C:\CTR\DATA\Polypropylene110-040\TexTools\110_textools-rp_2.TXT

{040} C:\CTR\DATA\Polypropylene110-040\TexTools\040_textools-rp_2.TXT

PoleDisp ContourDisp {110}Orientation {040}Orientation Calc

Result

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.362	0.261	0.377	0.043	-0.109	0.066
{040}	0.364	0.305	0.331	0.046	-0.043	-0.0030
a-axis	0.362	0.257	0.382	0.042	-0.115	0.073
b-axis	0.364	0.305	0.331	0.046	-0.043	-0.0030
c-axis	0.274	0.439	0.287	-0.089	0.158	-0.069

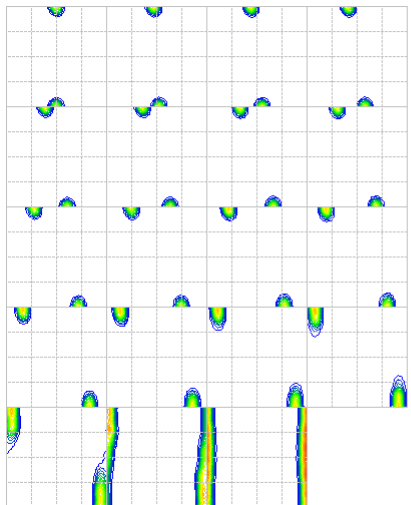
ResultFile

{110}、{040}から
A-axis,b-axis,c-axis方向の
ND,RD,TDを計算します。

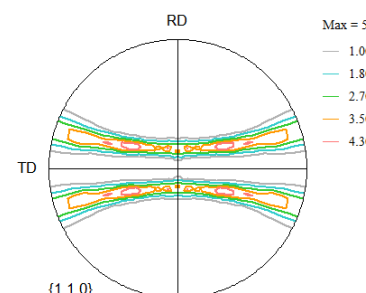
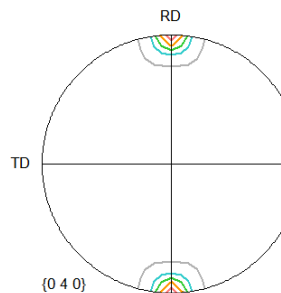
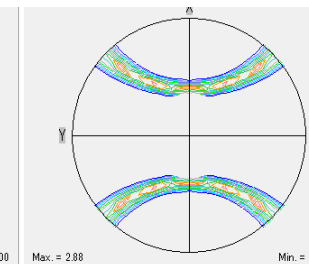
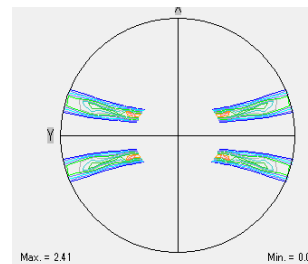
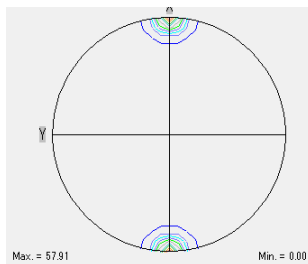
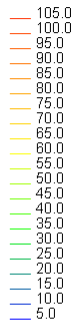
80%-10deg

TexToolsで解析 <010> //RD-Fiber

filename: W:\測定データ\材料 - P P\2014-10-18-test\80%-10deg-ND\TexTools\80%-10deg.HODF

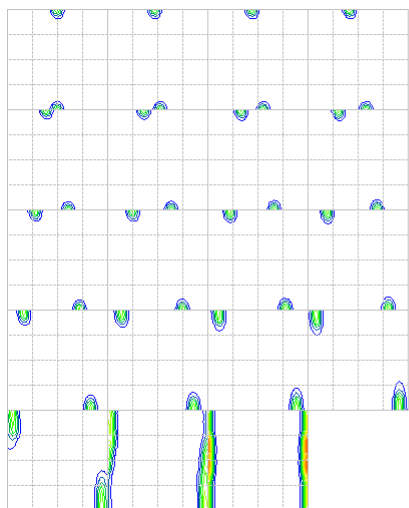


Max=109.2
Min=0.06

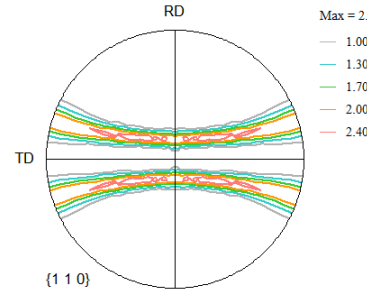
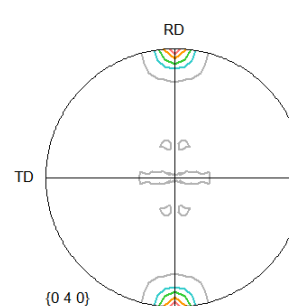
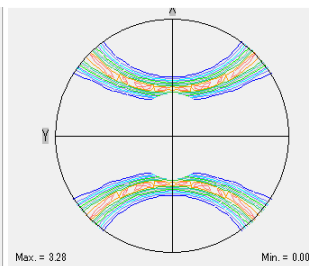
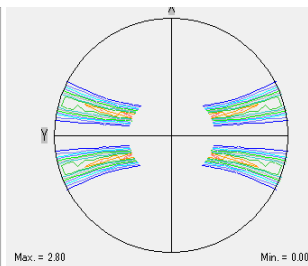
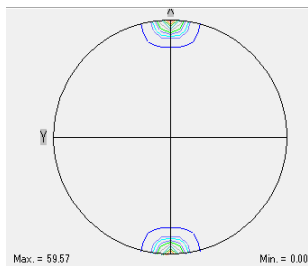
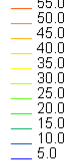


40%-10deg

filename: W:\測定データ\材料 - P P\2014-10-18-test\40%-10deg-ND\TexTools\40%-10.HODF



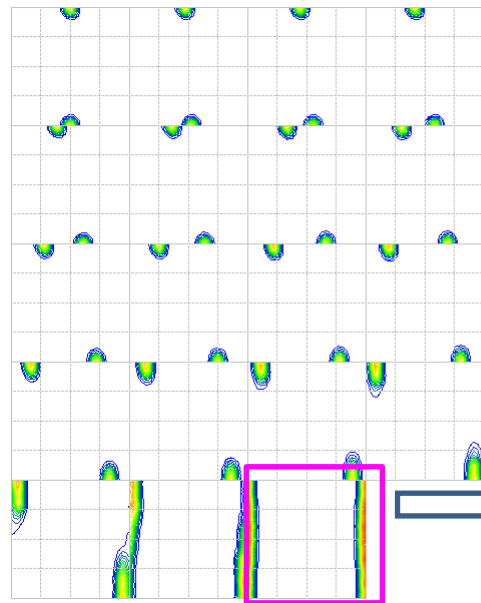
Max=59.08
Min=0.3



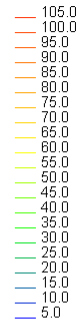
TexToolsのODF解析では、ODFMax方位密度は80%が109.2、40%では59.08

TexToolsのODF

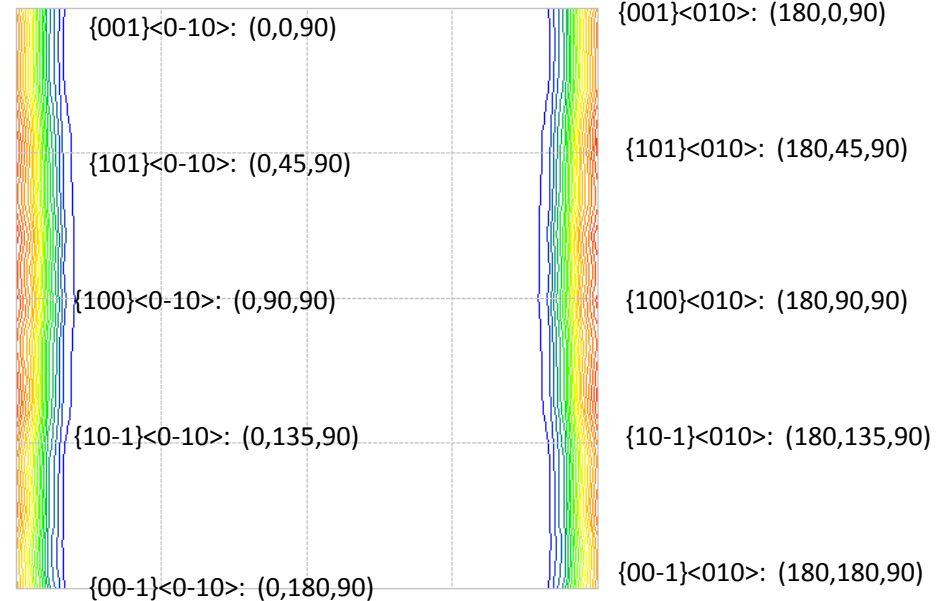
filename: W:\測定子-タO材料-PP\2014-10-18-test\80%-10deg-ND\TexTools\80%-10deg.HODF



Max=109.2
Min=0.06

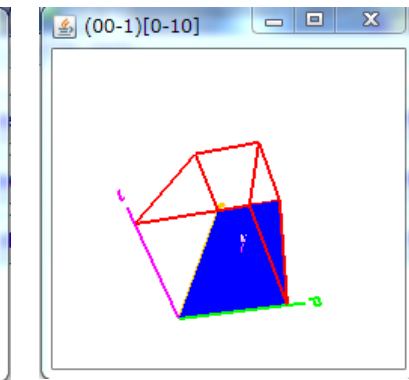
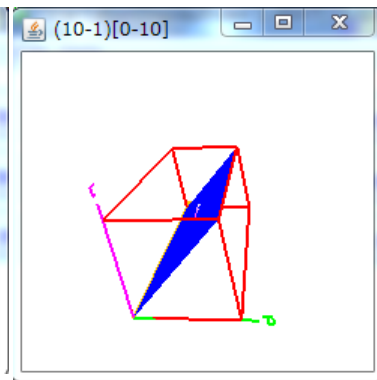
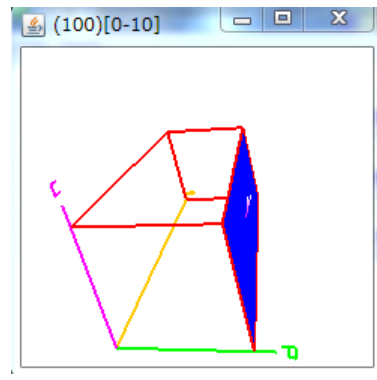
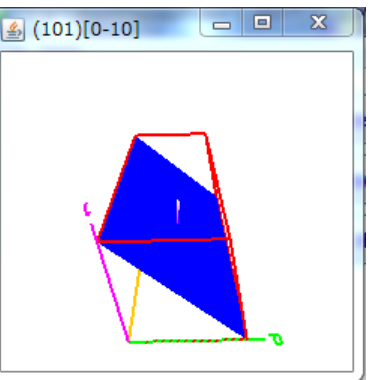
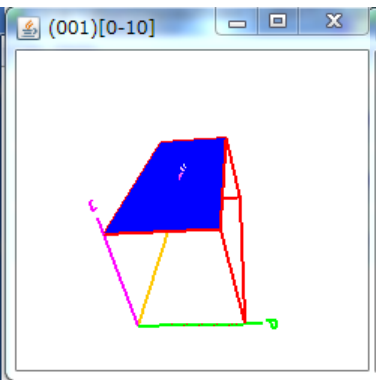
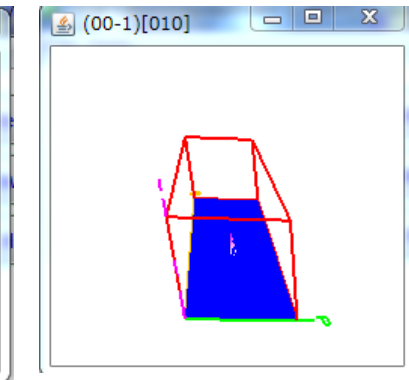
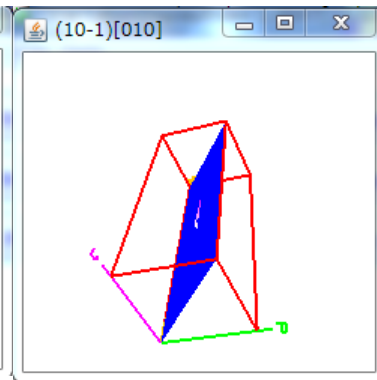
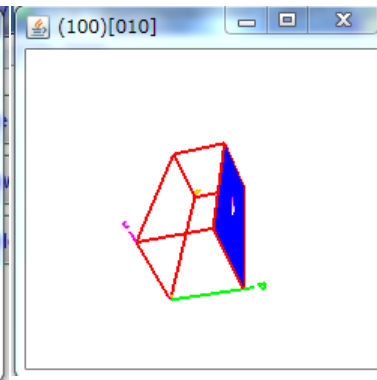
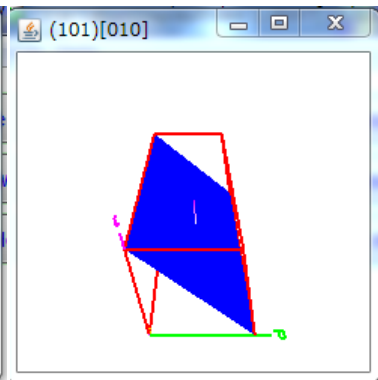
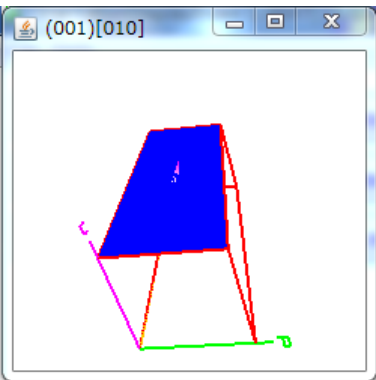


Bungeψ2section
0 180
ψ1
0 180
ψ2=0->90
step=5.0



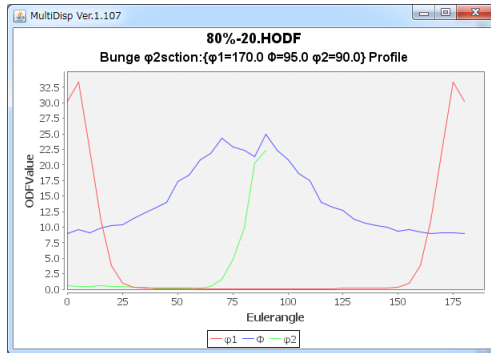
RD方向<010>を軸に{h0l}がrandom状態である事が分かります。
{h0l}には{00l}や{h00}を含みます。

$\langle 010 \rangle // \text{RD}$ – Fiber



TexToolsで解析<010>//RD—Fiberを定量

80%-10deg



Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations Fibers

Cube component: [dropdown]

phi1 [0] Phi [0] phi2 [0]

Tolerance (degree): [15]

With sample symmetrical orientations (4 fold)

h [0] k [4] l [0]

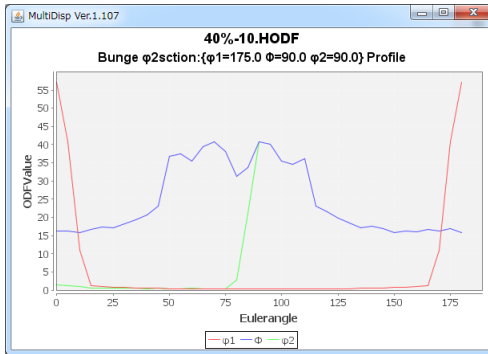
Tolerance (degree): [30]

ODF File Name: W:\測定データ\材料-PP\2014-10-18-test\80%-10deg-ND\TexTools\80%-10deg.HODF >>

Result: [75.54%]

[Calculate] [Cancel]

40%-10deg



Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations Fibers

Cube component: [dropdown]

phi1 [0] Phi [0] phi2 [0]

Tolerance (degree): [15]

With sample symmetrical orientations (4 fold)

h [0] k [4] l [0]

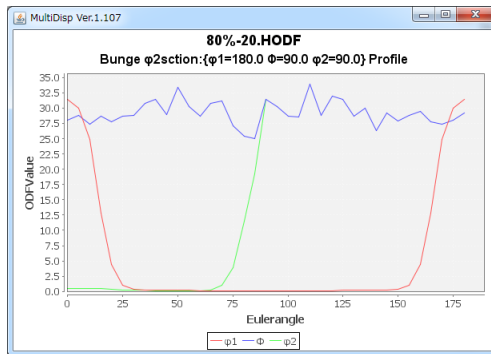
Tolerance (degree): [25]

ODF File Name: W:\測定データ\材料-PP\2014-10-18-test\40%-10deg-ND\TexTools\40%-10.HODF >>

Result: [87.22%]

[Calculate] [Cancel]

80%-20deg



Orientation Volume Fraction

Ideal Orientations Fibers

Cube component: [dropdown]

phi1 [0] Phi [0] phi2 [0]

Tolerance (degree): [15]

With sample symmetrical orientations (4 fold)

h [0] k [4] l [0]

Tolerance (degree): [30]

ODF File Name: W:\測定データ\材料-PP\2014-10-18-test\80%-20deg-ND\TexTools\80%-20.HODF >>

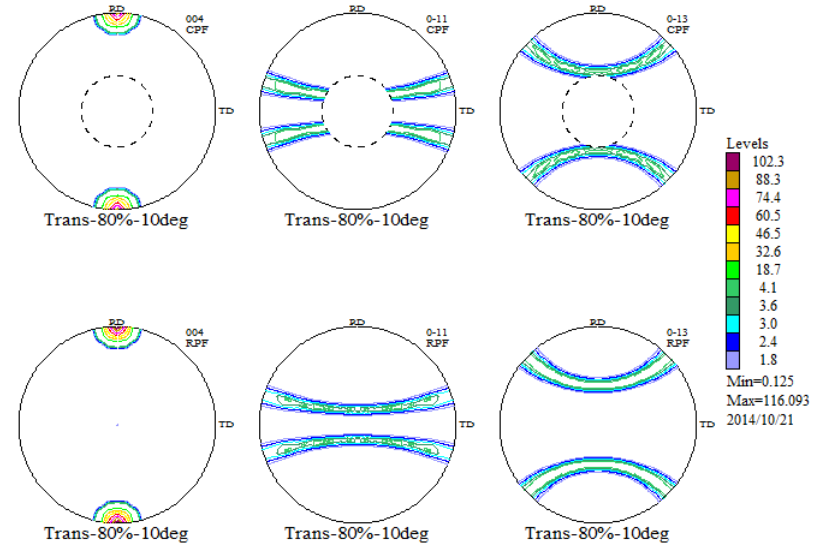
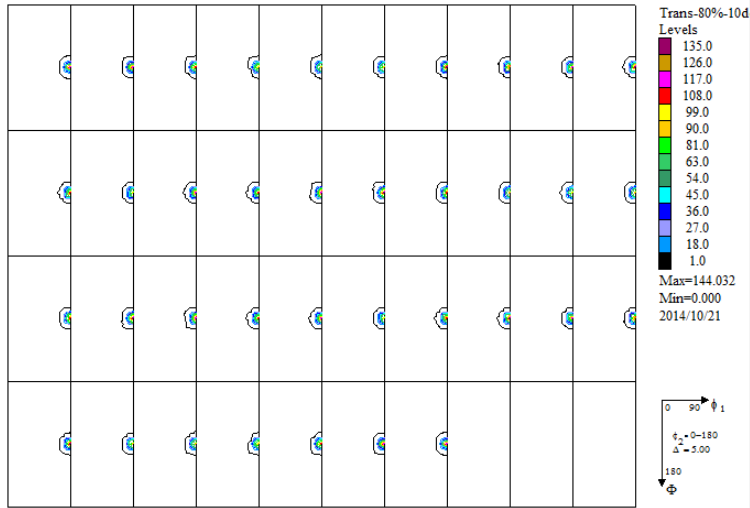
Result: [72.69%]

[Calculate] [Cancel]

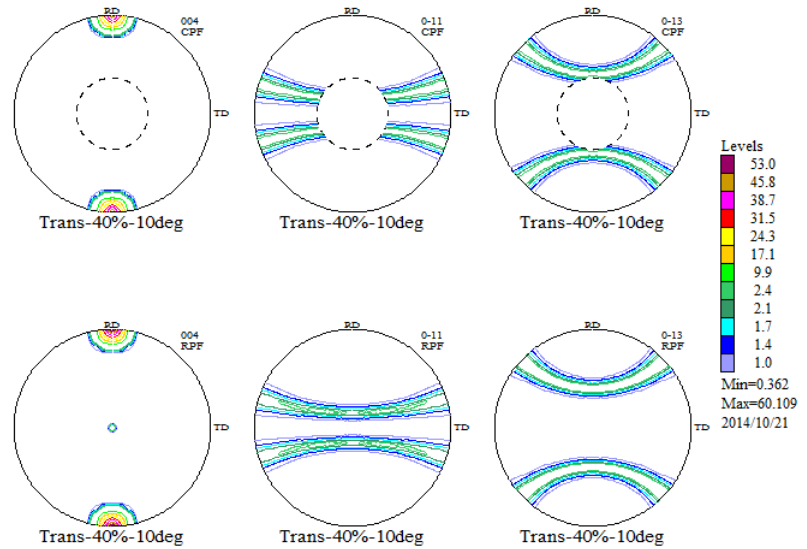
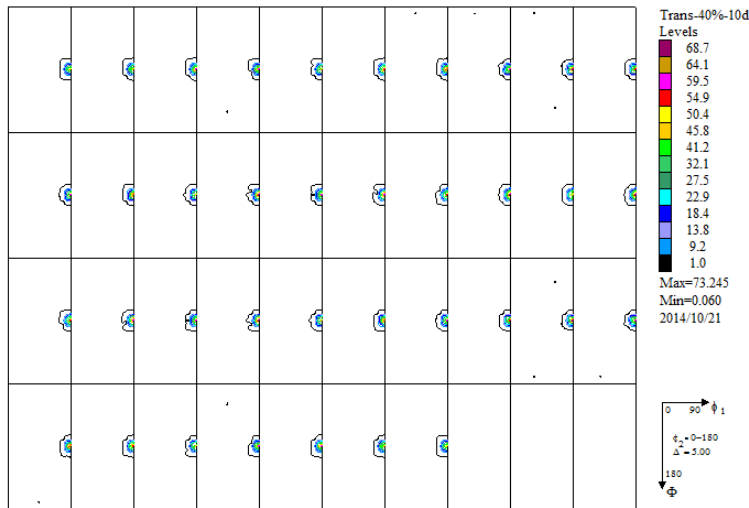
ODF解析では方位の広がりを含むVolumeFractionが求められます。

80%-10deg

TexToolsで解析 <001> //RD-Fiber

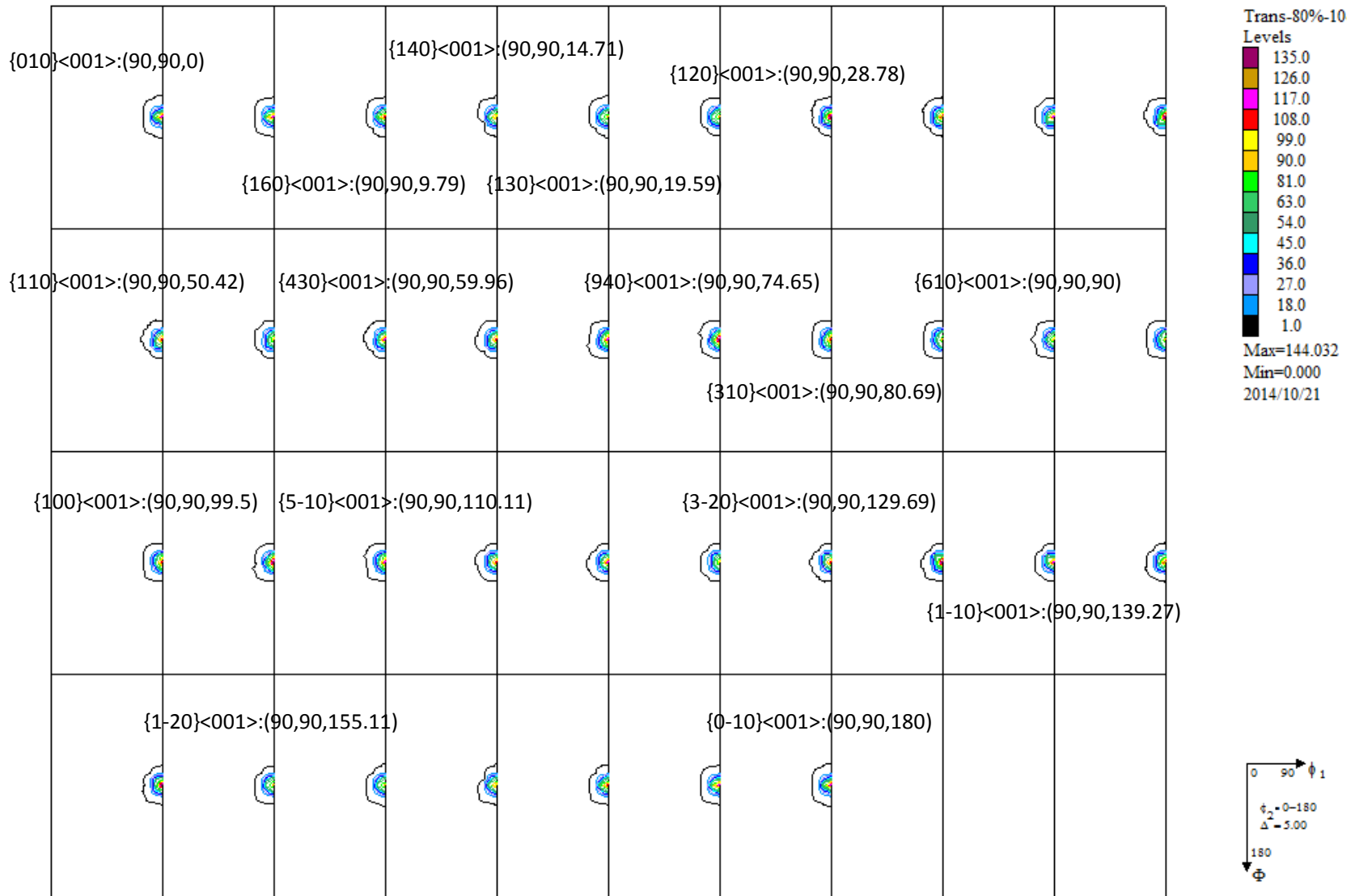


40%-10deg



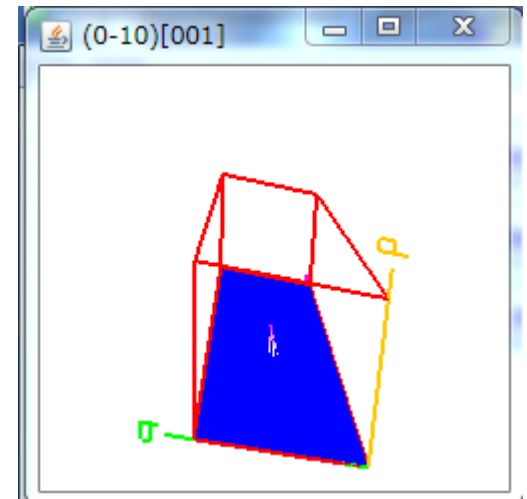
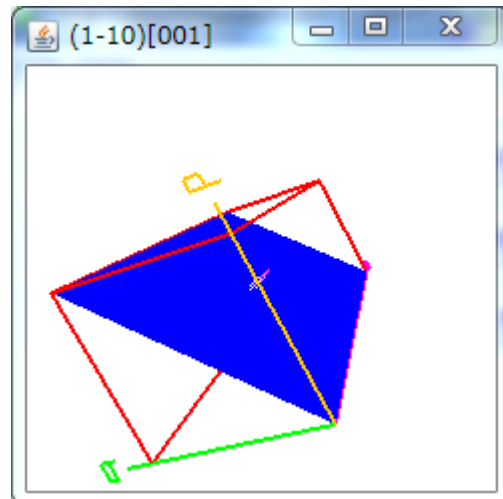
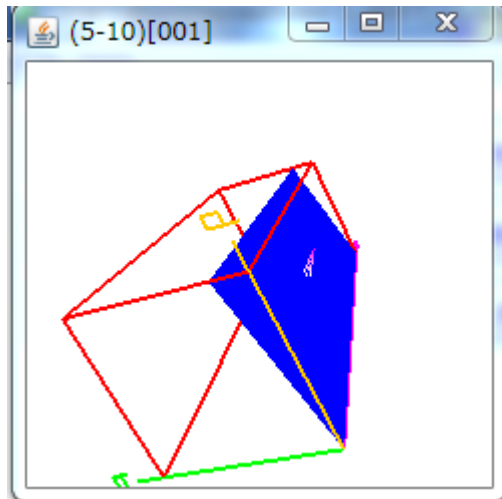
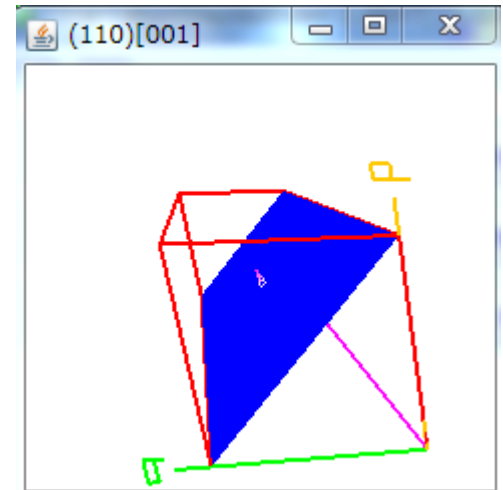
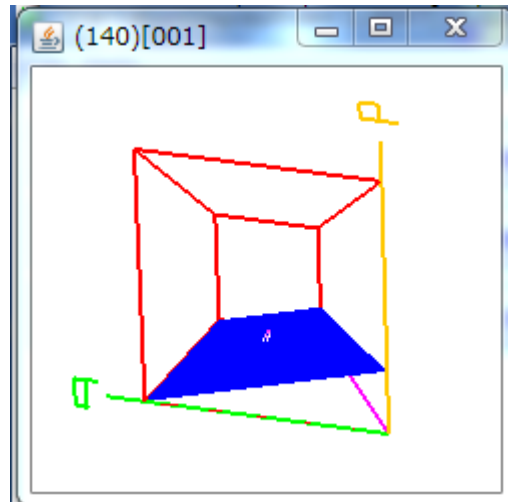
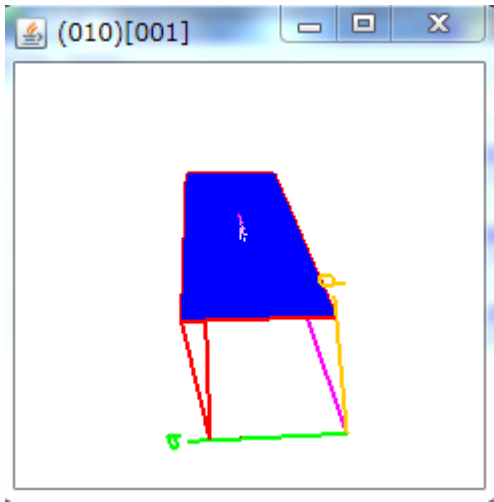
TexToolsのODF解析では、ODFMax方位密度は80%が144、40%では73. 2

LaboTexのODF



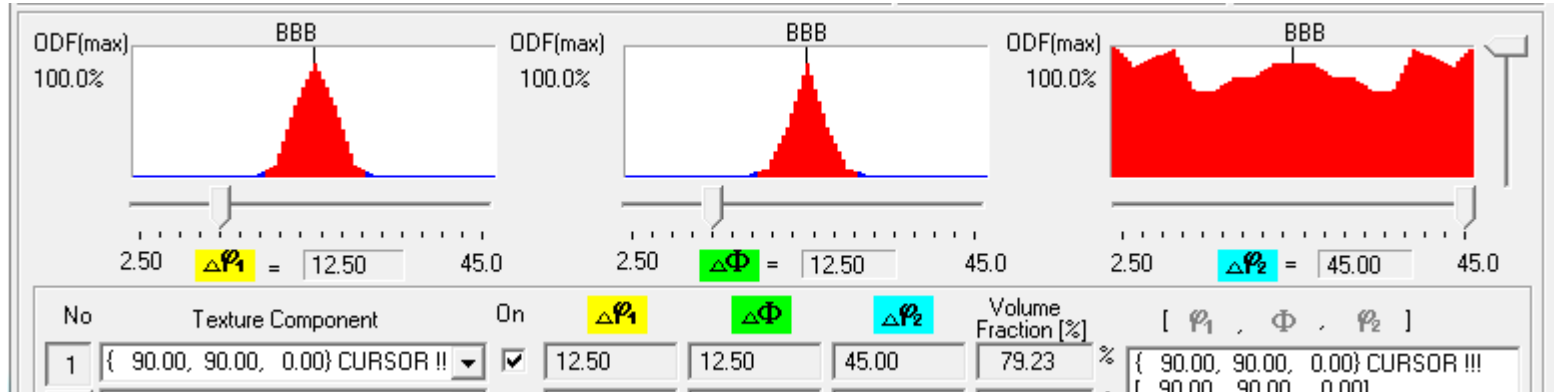
RD方向 $\langle 001 \rangle$ を軸に $\{hk0\}$ がrandom状態である事が分かります。
 $\{hk0\}$ には $\{h00\}$ や $\{0l0\}$ を含みます。

$\langle 001 \rangle // \text{RD}$ – Fiber

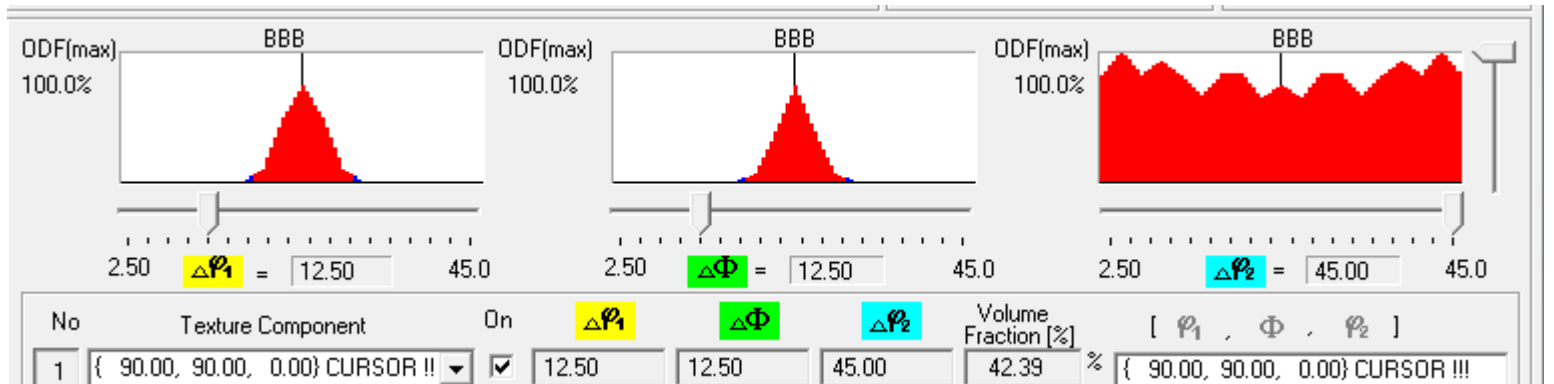


LaboTexで解析<001>//RD—Fiberを定量

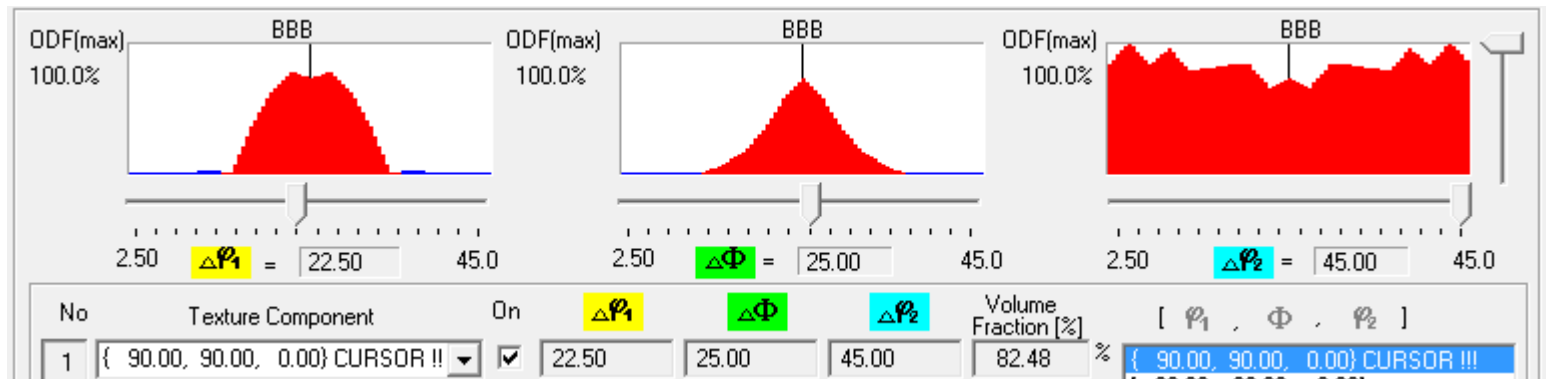
80%-10deg



40%-10deg



80%-20deg



ODF解析では方位の広がりを含むVolumeFractionが求められます。

まとめ

- 透過極点図処理はバックグラウンド除去、吸収補正を行う
- 反射極点図処理はバックグラウンド除去、defocus(吸収を含めた)を行うが補正量が難しい
- 1軸配向の場合、配向軸、配向面に着目して解析を行う
- 配向度解析と配向分布関数解析は極点図の外周データのみで計算可能
- 測定時間 配向度 < 配向分布関数 < 配向関数 < ODF
- 配向関数解析では、軸配向は、完全極点図で計算、面配は、不完全反射極点図で計算
- 配向関数解析では、極密度 + 極密度の広がり の相対解析が出来る。
- 配向分布関数では、極密度 + 極密度の広がり の相対解析が出来る。
- ODF解析では、方位密度の絶対値定量解析

- 1軸配向解析では、配向分布関数と透過極点ODF解析の組み合わせが有利