

P o l y p r o p y l e n e、結晶軸方向の配向関数の計算

P P O r i e n t a t i o n ソフトウェア

Ver.1.04



Orientation と同じ小数点以下 4 桁としました。

2020年07月25日



HelperTex Office

不明な点は問い合わせください。

概要

P o l y p r o p y l e n e は、(1 0 0)、(0 4 0) は存在するが、(0 0 1) は存在していない。
このような条件で、a, b, c 軸の配向関数 (ND, RD, TD) を求める場合、
(1 1 0)、(0 4 0) 完全極点図から計算が可能である。

直接的な方法はODF解析を行い、{1 0 0}、{0 1 0}、{0 0 1} 極点図を再計算すれば
配向関数の計算は可能である。

ODF解析を行わないで、間接的に配向関数を計算する場合、1軸配向の配向係数の計算方法を
応用すれば、可能になります。

佐々木伸太郎先生の「高分子材料の配向評価」にある、ポリプロピレン1軸配向の計算式が
参考になります。

$$F_b = \langle \cos^2 \phi_{(040)} \rangle$$

$$F_c = 1 - 1.099 * \langle \cos^2 \phi_{(110)} \rangle - 0.901 * \langle \cos^2 \phi_{(040)} \rangle$$

$$F_a = 1 - (F_b + F_c)$$

1軸配向の場合、極点図の外周のみで計算するが、1軸配向でない場合、完全極点図から
ND, RD, TD別に上記計算式を用います。

環境

Windows (XP,7,8,10)、j a v a のランタイム、j a v a 3 Dは3 2ビットj a v a 環境
図形表示には、以下の連携ソフトウェアが必要

連携ソフトウェア

極点図表示には、PoleDisplayTXT2.jar (j a v a 3 Dで表示)

本ソフトウェアが組み込まれていなければ、極点図表示は出来ません。

等高線表示には、PoleFigureContourDisplayTXT2.jar

本ソフトウェアが組み込まれていなければ、等高線表示は出来ません。

配向関数表示には、Orientation.jar(ver.1.73以降)

Ver1.73以前のソフトウェアの場合、直接表示は出来ませんが、手動選択で表示可能

極点図表示を行わなければ、6 4ビットのj a v a 環境でも動作します。

6 4 b i t W i n d o w s 下で、極点図表示を行う場合、3 2 b i t j a v a 環境でお使いください。

Freeバージョンでは、期限が過ぎると連携ソフトウェアは使えなくなります。

連携ソフトウェア無しでも、多軸配向ポリプロピレンの配向関数計算は可能

計算検証

極密度の低いデータと高いデータで、間接的計算方法と直接的な計算方法を比較する。

ソフトウェアの使い方

入力データは、極点処理後の完全極点図TXT2データ {110}、{040}

透過極点図は、吸収補正、バックグラウンド削除データ

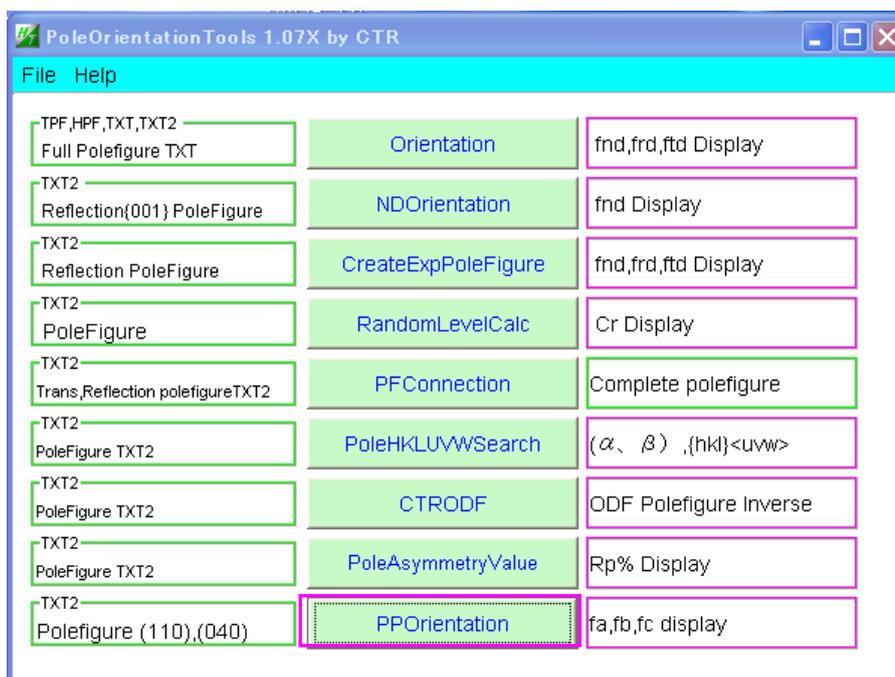
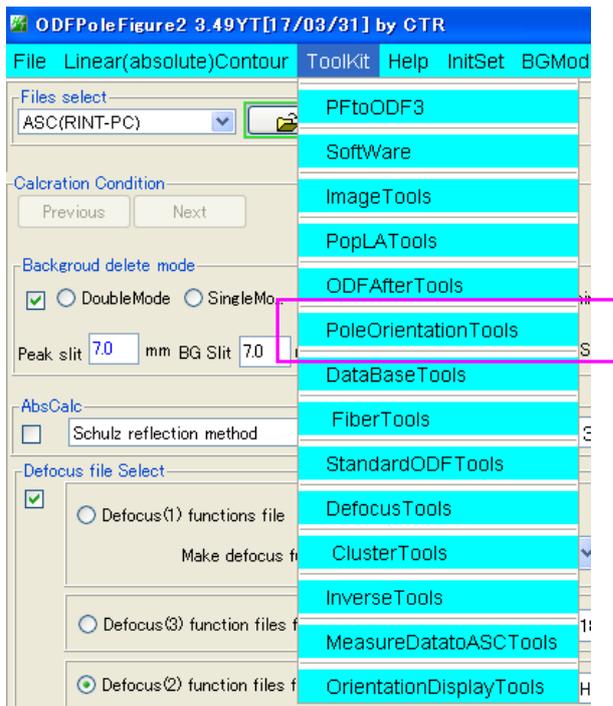
反射極点図は、defocus補正（吸収補正を含む）、バックグラウンド削除データ

透過極点図と反射極点図の接続

TXT2ファイル名は “110” 或いは “040” で始まるデータが望ましい。

ソフトウェアの起動

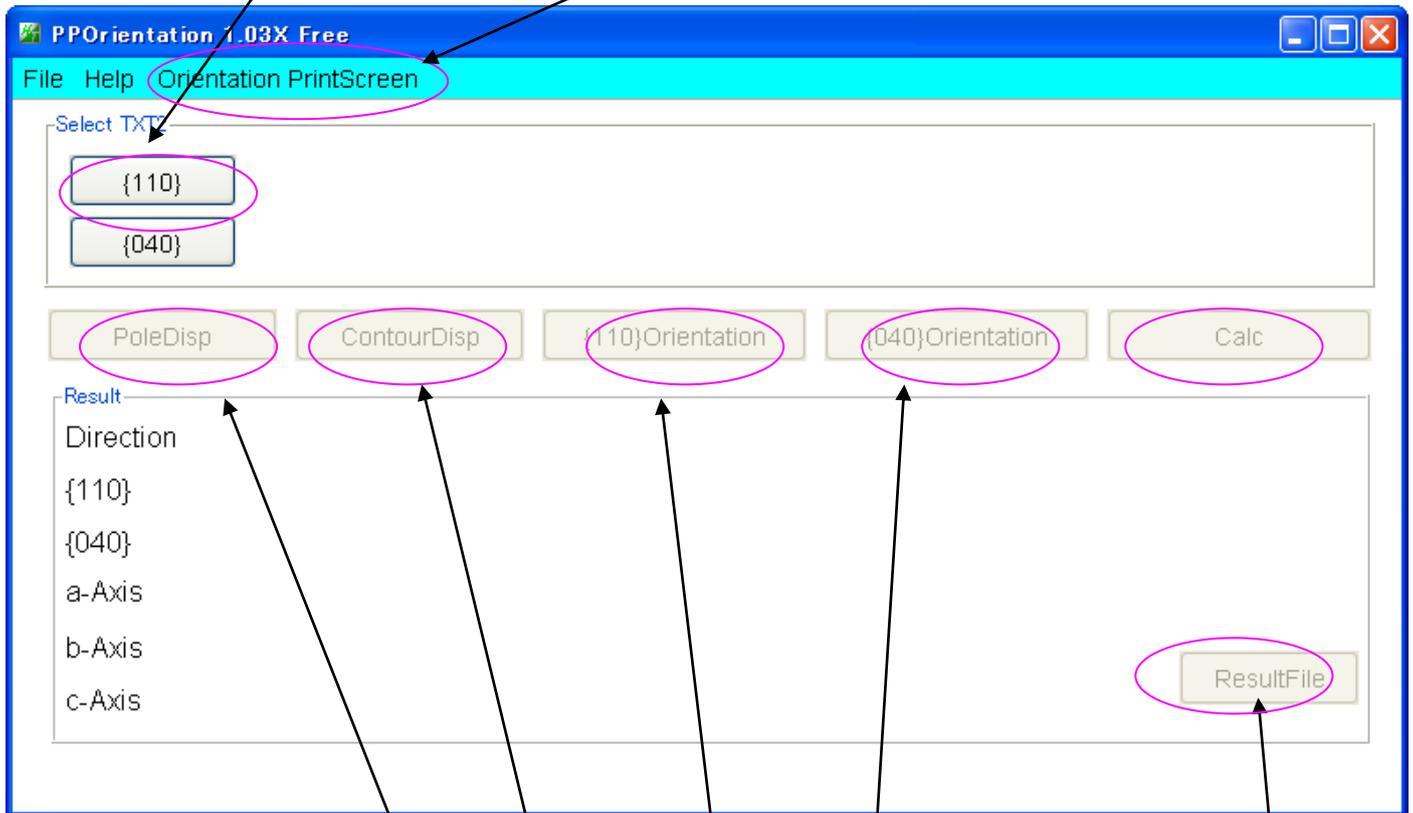
1. C:\¥CTR¥bin¥PPOrientation.jar ソフトウェアをダブルクリック
2. ODFPoleFigure2->ToolKit->PoleOrientationTools->PPOrientation をクリック



T X T 2データの { 1 1 0 }、{ 0 4 0 } データを同時選択

全極点図データでなければ、選択出来ません。

O r i e n t a t i o n 起動状態選択



選択されている極点データの極点図表示

選択されている極点データの極点図等高線表示

{ 1 1 0 } 配向関数計算表示

{ 0 4 0 } 配向関数計算表示

a , b , c 軸のND, RD, TD配向関数計算

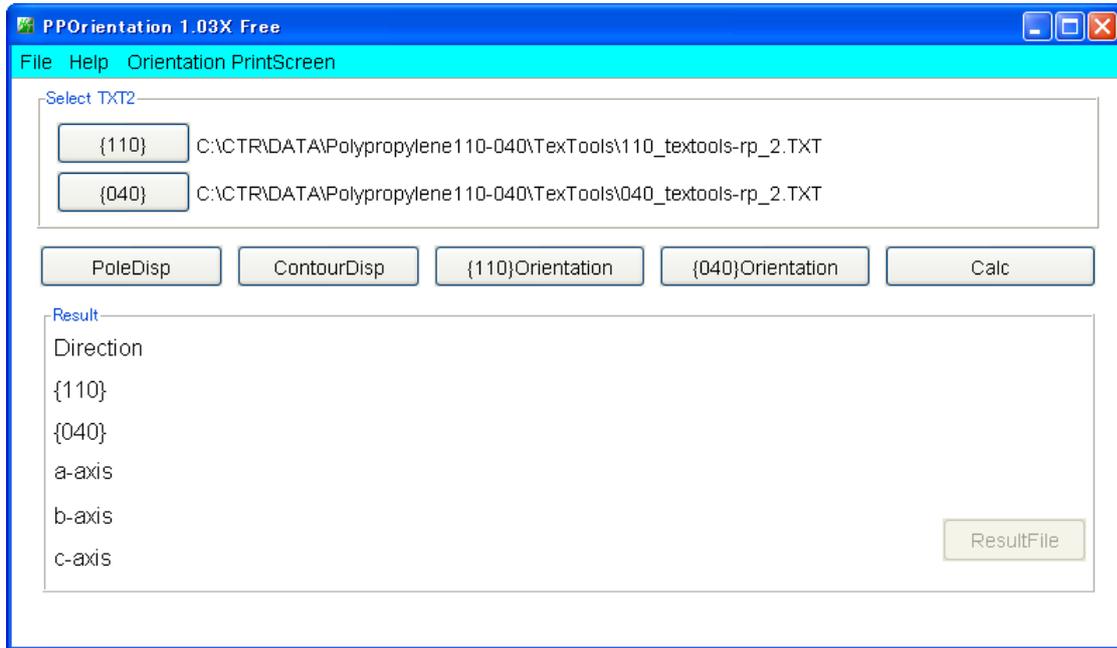
表示している計算結果のT X T表示

通常は、T X T 2ファイルを選択し、C a l cで計算します。

テストデータを選択

本来は、測定極点図のデータ処理後、透過+反射のデータから行うが、解析結果の真偽確認の為、ODF解析後の、再計算極点図 $\{110\}$, $\{040\}$, $\{100\}$, $\{001\}$ を用いる。

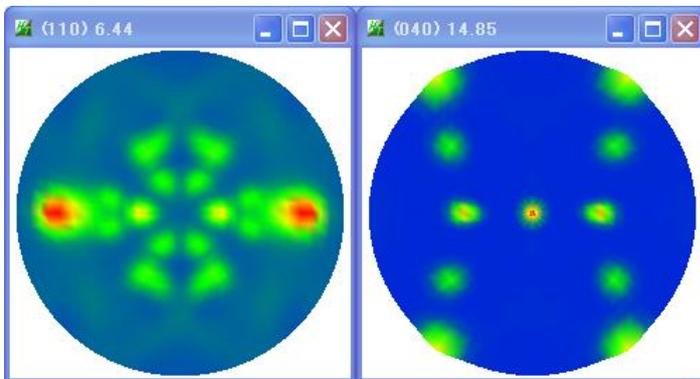
P P O r i e n t a t i o n の場合 $\{110\}$, $\{040\}$ から計算する。



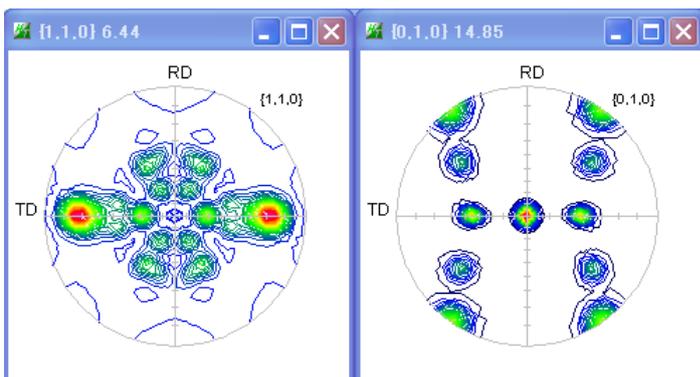
の部分は

組み込まれているサポートソフトウェアの状態で異なります。

極点図表示 



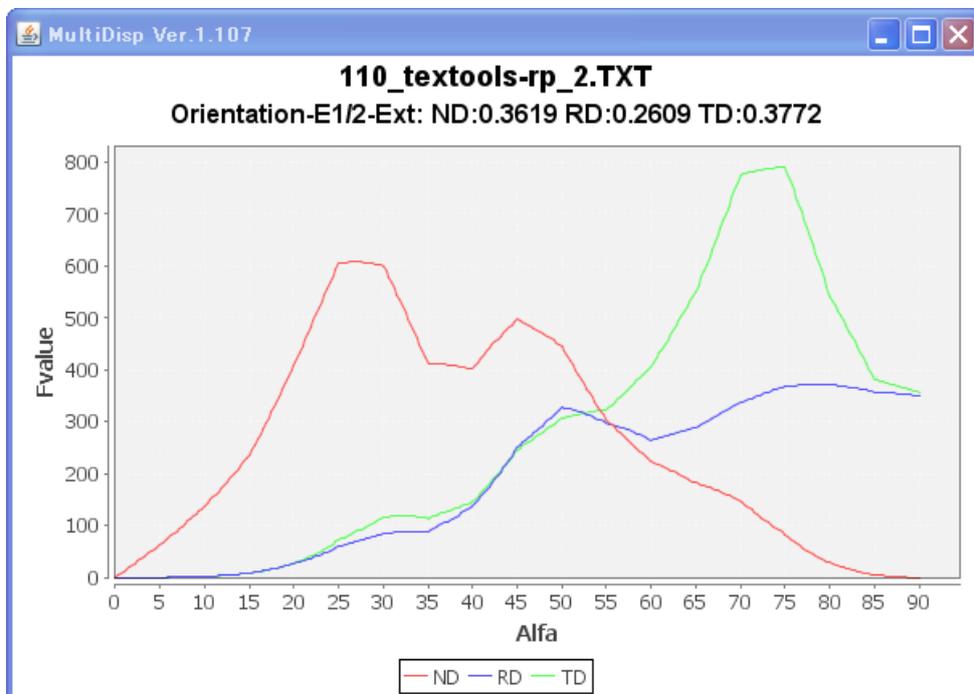
等高線表示 



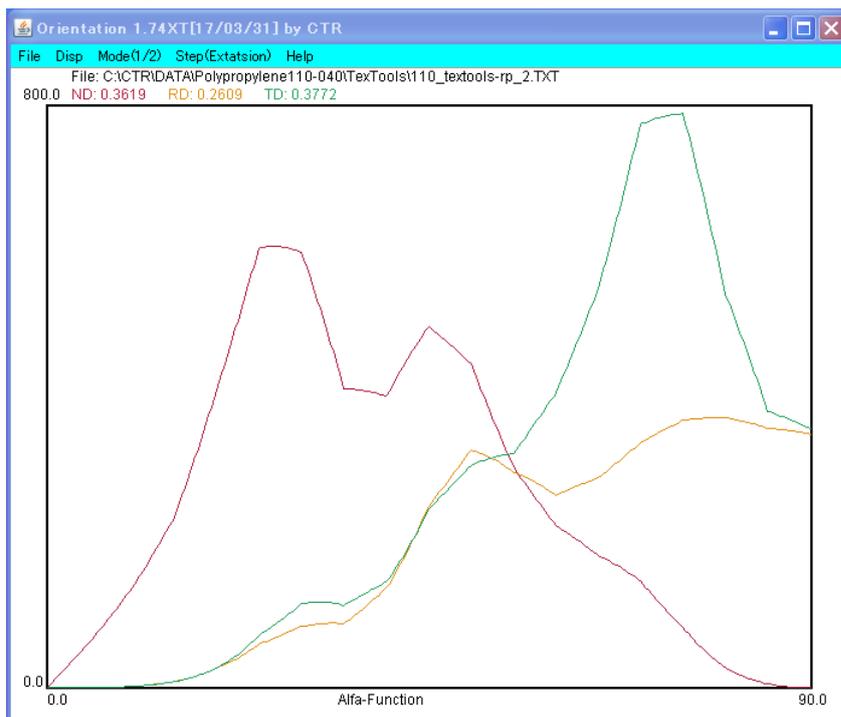
等高線表示では $\{040\}$ は $\{010\}$ に変えて表示されます。

Orientation による $\{110\}$ の配向関数表示 {110}Orientation (完全極点から計算)

Orientation ソフトウェアのバージョンが 1.73 以前は、手動でファイルを選択してください。

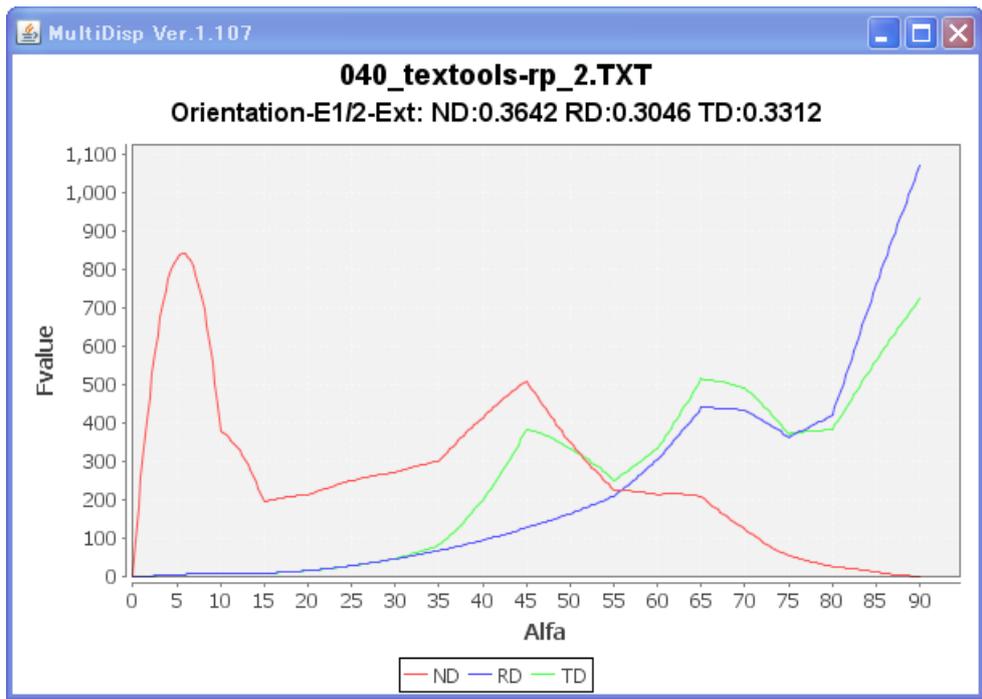


ND から fnd に変更する場合、MainScreen で行って下さい。

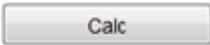


{0 4 0} の配向関数表示

{040}Orientation



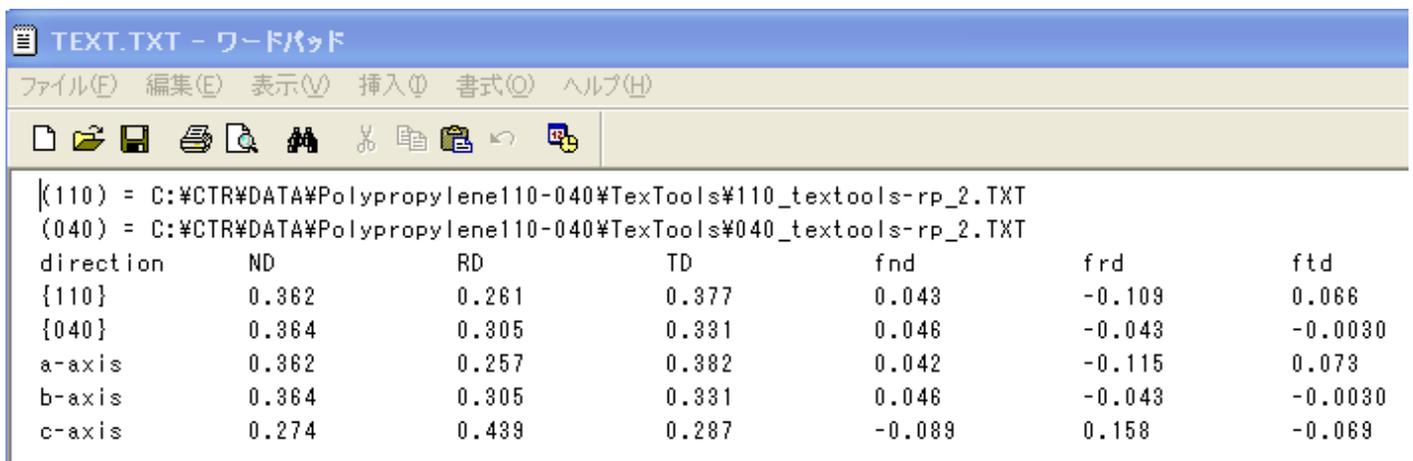
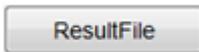
計算を開始



{1 1 0}、{0 4 0} 完全極点図から間接的に a-axis,b-axis,c-axis の ND,RD,TD 方向を計算

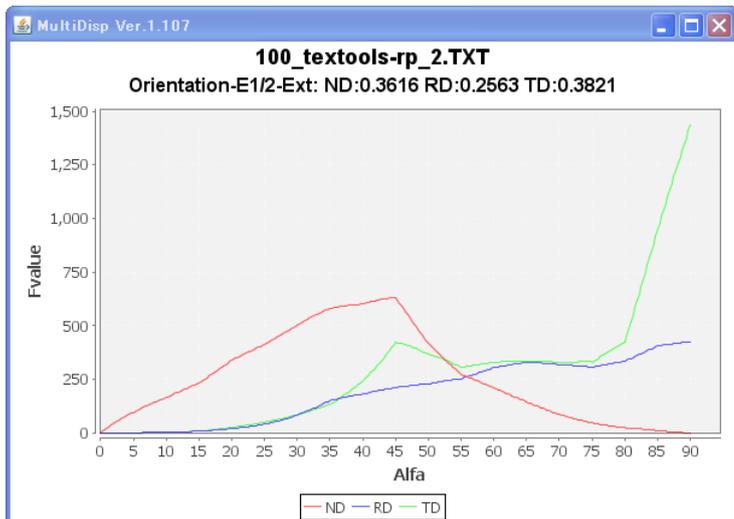


計算結果のテキスト表示

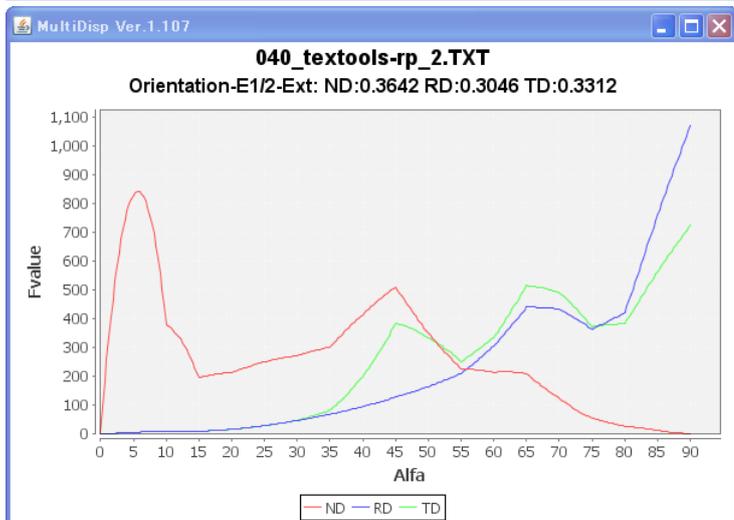


{0 4 0} は {0 1 0} であるから、b - a x i s と同じ値になります。

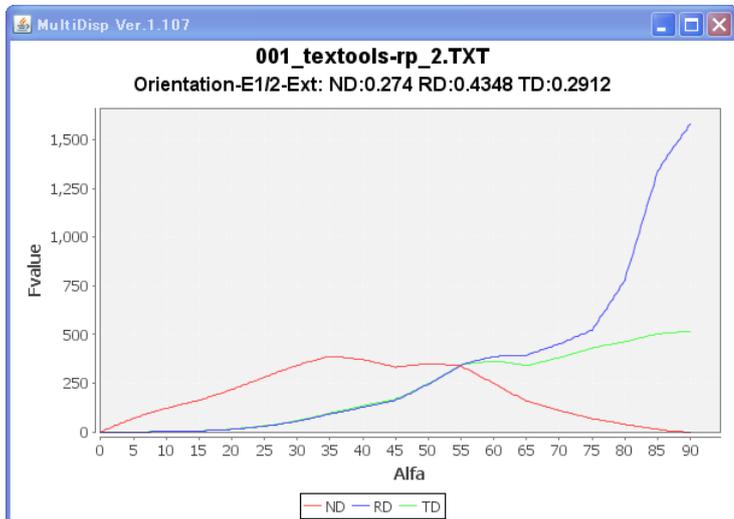
直接、ODF再計算極点図 $\{100\}$ 、 $\{010\}$ 、 $\{001\}$ から a-axis,b-axis,c-axis の ND,RD,TD 方向を計算



a-axis 0.362 0.257 0.382



b-axis 0.364 0.305 0.331



c-axis 0.274 0.439 0.287

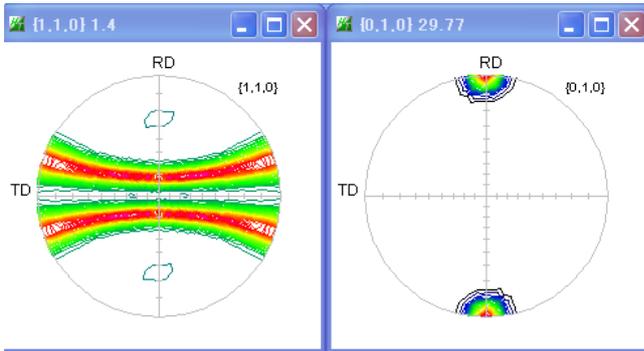
PPOrientationから計算したデータと直接計算した結果の比較

	PPOrientation			ODF $\{100\},\{010\},\{001\}$			PPOrientation/ODF		
	ND	RD	TD	ND	RD	TD			
a-axis	0.3620	0.2570	0.3820	0.3616	0.2563	0.3821	1.0011	1.0027	0.9997
b-axis	0.3640	0.3050	0.3310	0.3642	0.3046	0.3312	0.9995	1.0013	0.9994
c-axis	0.2740	0.4390	0.2870	0.2740	0.4348	0.2912	1.0000	1.0097	0.9856

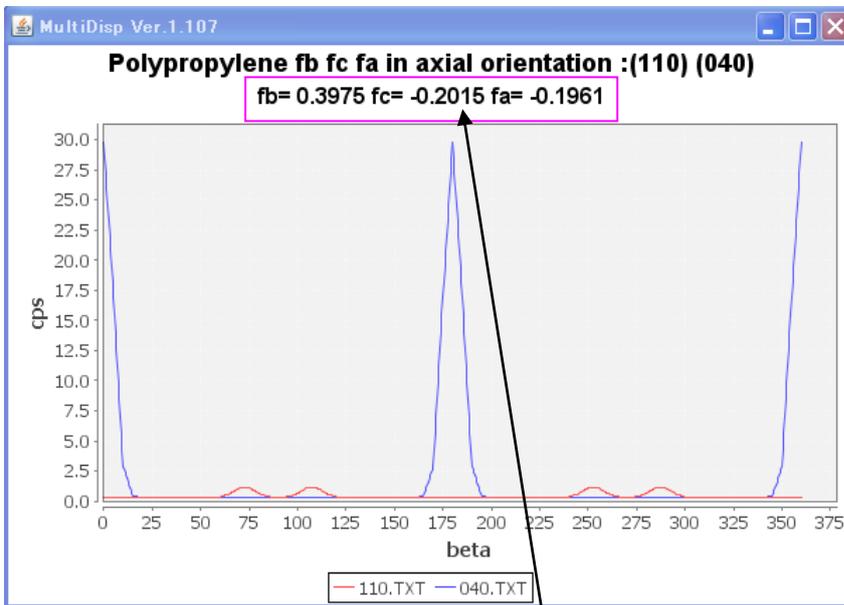
ほぼ同一結果が得られます。

SimpleFiberOrientationとの関係

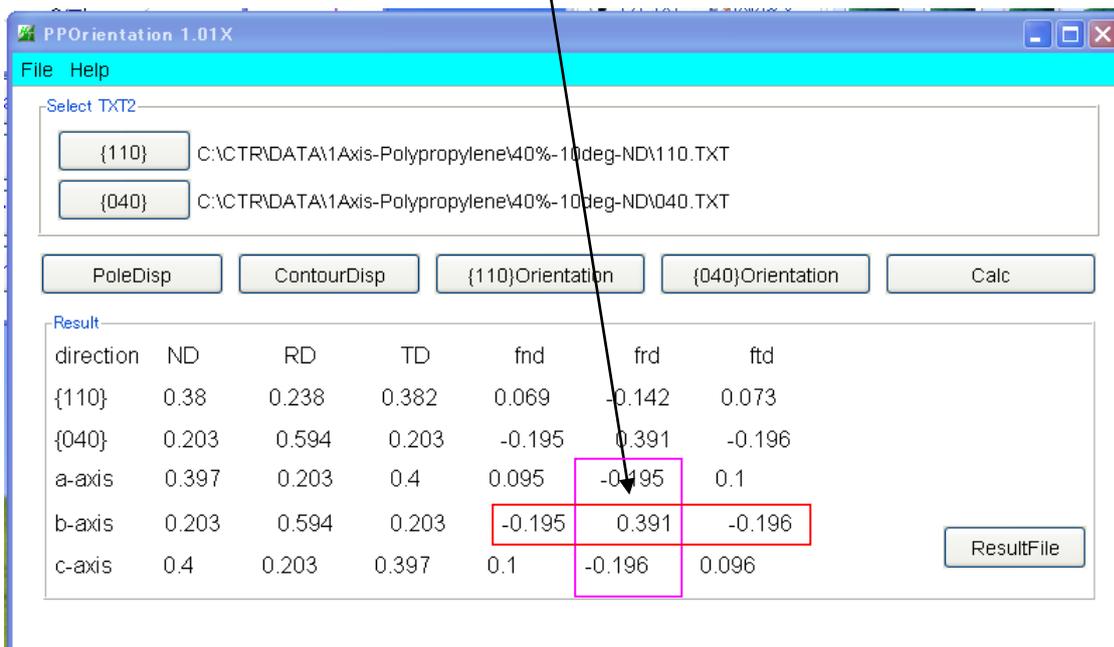
SimpleFiberOrientationは、1軸配向の場合のみ計算が可能ですが、完全極点図も読み込めます。完全極点図を読み込んだ場合、極点図の外周データを使って計算します。1軸配向データをSimpleFiberOrientationとPPOrientationを比較してみます。



FiberSimpleOrientation



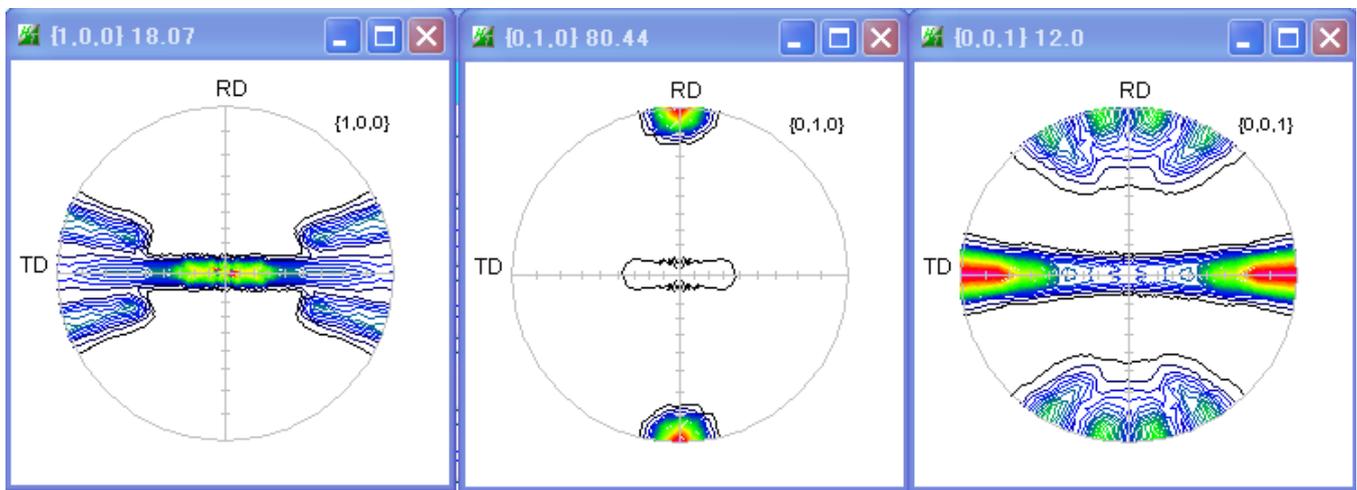
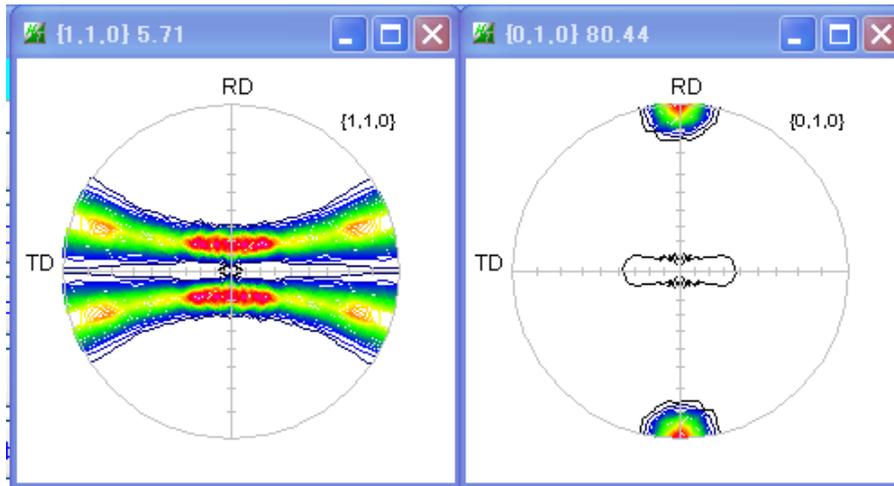
PPOrientation



値が若干異なるのは、データ間隔の問題とされます。

極密度の大きい場合も比較してみます。

TextToolsでODF解析したデータ {110} {040} で PPOrientation



PPOrientationで計算

PPOrientation 1.01X

File Help

Select TXT2

{110} C:\CTR\DATA\1Axis-Polypropylene\80%-10deg-RD\test\110_textools-rp_2.TXT

{040} C:\CTR\DATA\1Axis-Polypropylene\80%-10deg-RD\test\040_textools-rp_2.TXT

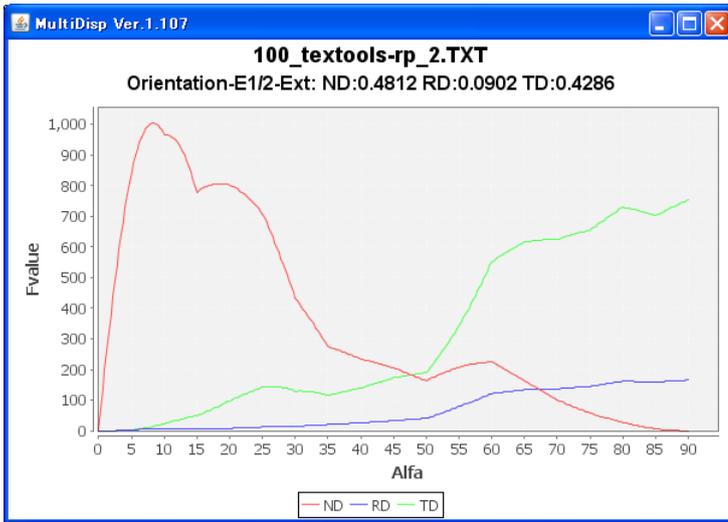
PoleDisp ContourDisp {110}Orientation {040}Orientation Calc

Result

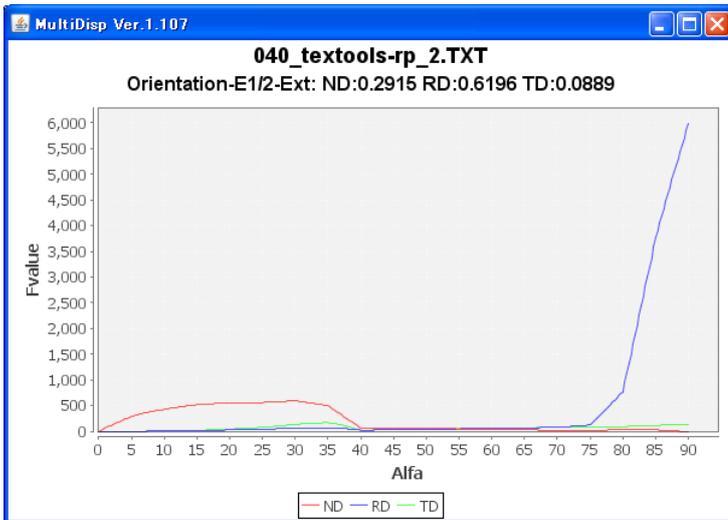
direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.462	0.139	0.399	0.194	-0.292	0.098
{040}	0.291	0.62	0.089	-0.063	0.429	-0.367
a-axis	0.479	0.091	0.43	0.219	-0.363	0.144
b-axis	0.291	0.62	0.089	-0.063	0.429	-0.367
c-axis	0.229	0.289	0.481	-0.156	-0.066	0.222

ResultFile

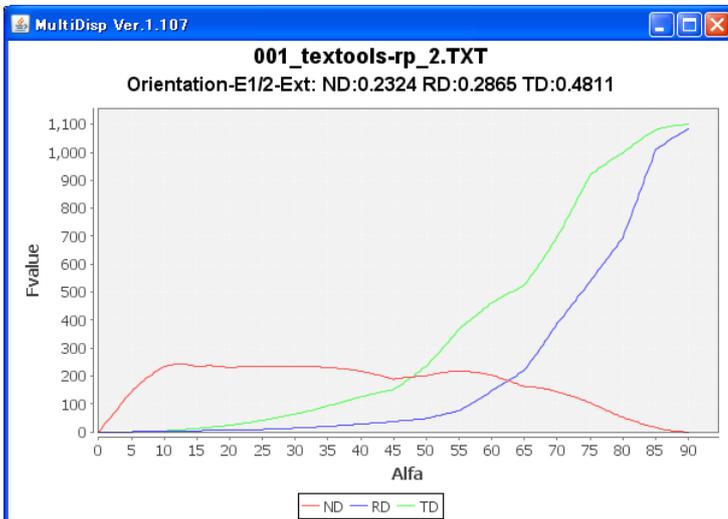
{100} {010} {001} でND,RD,TDを計算



a-axis 0.479 0.091 0.43



b-axis 0.291 0.62 0.089



c-axis 0.229 0.289 0.481

	POrientation			ODF{100}{010}{001}			POrientation/ODF		
	ND	RD	TD	ND	RD	TD			
a-axis	0.479	0.0910	0.4300	0.4812	0.0902	0.4286	0.9954	1.0089	1.0039
b-axis	0.291	0.6200	0.0890	0.2915	0.6196	0.0889	0.9983	1.0006	1.0011
c-axis	0.229	0.2890	0.4810	0.2324	0.2865	0.4811	0.9854	1.0087	0.9998

間接方法と直接方法がほぼ一致します。