Polypropylene、結晶軸方向の配向関数の計算

PPOrientationソフトウエア

Ver.1.04

🔏 PPOrientati	on 1.03X Fr	ee								
File Help Or	ientation Pri	ntScreen								
-Select TXT2-										
{110} C:\CTR\DATA\Polypropylene110-040\TexTools\110_textools-rp_2.TXT										
						·				
PoleDisp ContourDisp {110}Orientation {040}Orientation Calc										
Result										
direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd				
{110}	0.3618	0.2609	0.3772	0.0428	-0.1086	0.0658				
{040}	0.3642	0.3046	0.3312	0.0462	-0.0430	-0.0032				
a-axis	0.3616	0.2565	0.3817	0.0424	-0.1151	0.0726				
b-axis	0.3642	0.3046	0.3312	0.0462	-0.0430	-0.0032				
c-axis	0.2741	0.4388	0.2870	-0.0887	0.1582	-0.0694	ResultFile			

Orientation と同じ小数点以下4桁としました。



Polypropyleneは、(100)、(040)は存在するが、(001)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、

(110)、(040)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、{100}、{010}、{001} 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 = < C o s² ϕ (040) >F c = 1 - 1. 0 9 9 * < C o s² ϕ (110) > - 0. 9 0 1 * < C o s² ϕ (040) >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エアが必要

連携ソフトウエア

極点図表示には、PoleDispplayTXT2.jar

(j a v a 3 D で表示)

本ソフトウエ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

本ソフトウエ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以前のソフトウエアの場合、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、64ビットのjava環境でも動作します。
 64bitWindows下で、極点図表示を行う場合、32bitjava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エアは使えなくなります。 連携ソフトウエア無しでも、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。

ソフトウエアの使い方

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。 ソフトウエアの起動

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

ODFPoleFigure2 3.49YT[17/03/31] by CTR									
File Linear(absolute)Contour	ToolKit Help InitSet BGMod								
Files select ASC(RINT-PC)	PFtoODF3								
	SoftWare								
Calcration Condition Previous Next	ImageTools								
	PopLATools								
Backgroud delete mode	ODFAfterTools								
Peak olit 7.0 mm BG Slit 7.0	PoleOrientationTools								
	DataBaseTools								
AbsCalc Schulz reflection method	FiberTools								
Defocus file Select	StandardODFTools								
Defocus(1) functions file	DefocusTools								
Make defocus f	ClusterTools								
	InverseTools								
O Defocus(3) function files t	MeasureDatatoASCTools								
⊙ Defocus(2) function files f	OrientationDisplayTools H								

File Help TPF,HPF,TXT,TXT2 Orientation fnd,frd,ftd Display Full Polefigure TXT Orientation fnd,frd,ftd Display TXT2 NDOrientation fnd Display TXT2 Reflection{001} PoleFigure CreateExpPoleFigure fnd,frd,ftd Display	PoleOrientationTools 1.07X by CTR									
TPF,HPF,TXT,TXT2 Orientation fnd,frd,ftd Display Full Polefigure TXT NDOrientation fnd Display TXT2 NDOrientation fnd Display TXT2 Reflection{001} PoleFigure CreateExpPoleFigure fnd,frd,ftd Display	File Help									
TXT2 NDOrientation fnd Display TXT2 Reflection PoleFigure CreateExpPoleFigure fnd,frd,ftd Display	TPF,HPF,TXT,TXT2 Full Polefigure TXT	Orientation	fnd,frd,ftd Display							
TXT2 CreateExpPoleFigure fnd,frd,ftd Display	TXT2	NDOrientation	fnd Display							
	TXT2 Reflection PoleFigure	CreateExpPoleFigure	fnd,frd,ftd Display							
PoleFigure RandomLevelCalc Cr Display	PoleFigure	RandomLevelCalc	Cr Display							
TXT2 Trans,Reflection polefigureTXT2 PFConnection Complete polefigure	TXT2 Trans,Reflection polefigureTXT2	PFConnection	Complete polefigure							
TXT2 PoleHkLUVWSearch (α、β), {hkl} <uvw></uvw>	-TXT2 PoleFigure TXT2	PoleHKLUVWSearch	(α、β) ,{hkl} <uvw></uvw>							
PoleFigure TXT2 CTRODF ODF Polefigure Inverse	-TXT2 PoleFigure TXT2	CTRODF	ODF Polefigure Inverse							
PoleFigure TXT2 PoleAsymmetryValue Rp% Display	TXT2 PoleFigure TXT2	PoleAsymmetryValue	Rp% Display							
Polefigure (110),(040) PPOrientation fa,fb,fc display	TXT2 Polefigure (110),(040)	PPOrientation	fa,fb,fc display							

TXT2データの {110}、{040} 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。

Orientation起動状態選択



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。 PPOrientationの場合 $\{110\}, \{040\}$ から計算する。

🖁 PPOrientation 1.03X Free	
File Help Orientation PrintScreen	
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	
Pesult Direction {110} {040} a-axis b-axis c-axis	ltFile
PoleDisp ContourDisp {110}Orientation {040}Orientation	部分は

組み込まれているサポートソフトウエアの状態で異なります。



Orientation による {110} の配向関数表示 {110)Orientation

(完全極点から計算)

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





MainScreen に変えると Orientation のスタート画面が

表示される。NDからfndに変更する場合、MainScreenで行って下さい。





{110}、{040} 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

🎽 PPOrienta	🖀 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									
_Result—									
direction	n 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		
1									

計算結果のテキスト表示

ResultFile

TEXT.TXT	- ワードパッド					
ファイル(E) 編集	(E) 表示(⊻) 挿,	入邸 書式(0) へ川	レプ(日)			
D 🖻 🖬 🧯	3 d. m %	🖻 🛍 🗠 💁				
(110) = C:¥ (040) = C:¥	CTR¥DATA¥Polyp CTR¥DATA¥Polyp	ropylene110-040 ropylene110-040	¥TexTools¥110_† ¥TexTools¥040_†	textools-rp_2.TX1 textools-rp_2.TX1	T T	
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

 $\{040\}$ は $\{010\}$ であるから、b-axisと同じ値になります。



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	0.331.0	0.3642	0.3046	0.3312	0.9995	1.0013	0.9994
c-axsi	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

Ma P	'POrientatio	on 1.01X						🖄
File	Help							
51	Select TXT2—							
	(110)				1000/ 1) TVT	
	{110}			із-Роіургору	/10/10/20/20/2017	waeg-NDVIII	J. I X I	
	{040}	C:\C	FR\DATA\1Ax	is-Polypropy	/lene\40%-1	0 4 eg-ND\040).TXT	
ſ	PoleDis	sn	ContourD	isn	{110}Orient	atinn	{040}Orientation	Calc
	1 0.000				(110)0110112		(010) Onentation	
Г	Result							
	direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd	
	{110}	0.38	0.238	0.382	0.069	-p.142	0.073	
	{040}	0.203	0.594	0.203	-0.195	0 .391	-0.196	
	a-axis	0.397	0.203	0.4	0.095	-0495	0.1	
	b-axis	0.203	0.594	0.203	-0.195	0.391	-0.196	
	c-axis	0.4	0.203	0.397	0.1	-0.196	0.096	ResultFile

値が若干異なるのは、データ間隔の問題と思われます。

極密度の大きい場合も比較してみます。

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





PPOrientationで計算

PPOrientati	ion 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			
<u> </u>										

{100} {010} {001} で ND,RD,TD を計算



	PPOrien	tation		ODF{100}{	01 0}(001 }		PPOrientation/ODF		
	ND	RD	TD	ND	RD	TD			
a-axis	0.47	79 0.091	0 0.4300	0.4812	0.0902	0.4286	0.9954	1.0089	1.0033
b-axis	0.29	91 0.620	0 0.0890	0.2915	0.6196	0.0889	0.9983	1.0006	1.0011
c−axis	0.22	29 0.289	0 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。