

Pol y p r o p y l e n e 配向計算のシュミレーション

2025年08月05日

HelperTex Office

概要

MonoclinicのPolypropyleneの結晶軸方向（a, b, c）配向状態の計算は軸配向であれば、繊維試料台を用いて極点図の外周部分を測定し、計算による方法で解析が行われていた。極点試料台を用いる事で、Monoclinicの全ての配向状態評価が行われている。本資料では、測定から解析までをシュミレーションしてみます。

測定

吸収係数の測定

Siなどの回折線を用い、Si試料からカウンターの中に測定試料を入れ、測定試料なしの回折強度 I_o と測定試料ありの I_x を測定し
 $ut = -len(I_x / I_o)$ から計算する。
今回は $ut = 0.1$ としシュミレーションを行う。

反射測定

$\alpha = 30$ から 90 度

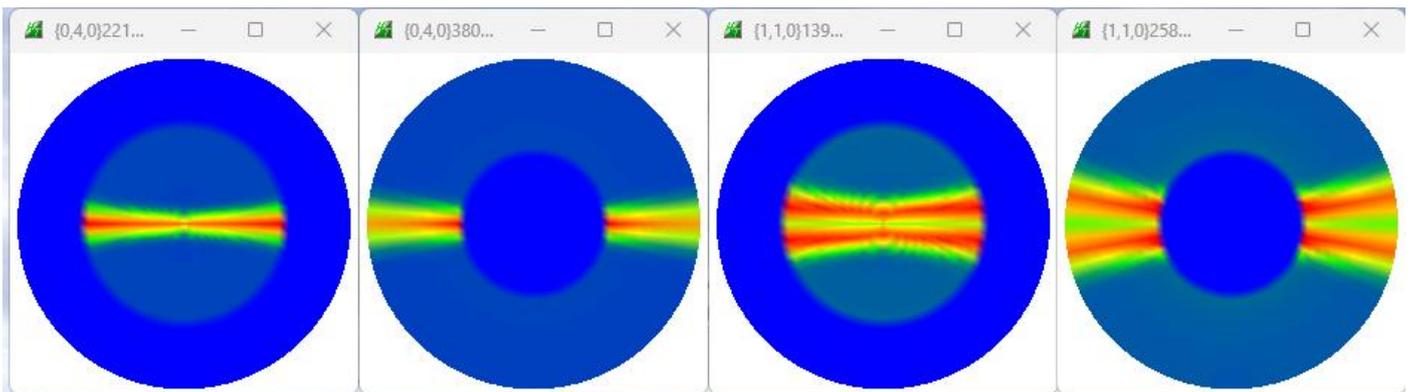
DS=1/4deg (2mm 制限)、Schulz スリット取り付け、SS,RS=10mm

透過測定

$\alpha = 0$ から 40 度

DS=0.1mm、SS,RS=10mm

測定されたデータ



極点図データ処理

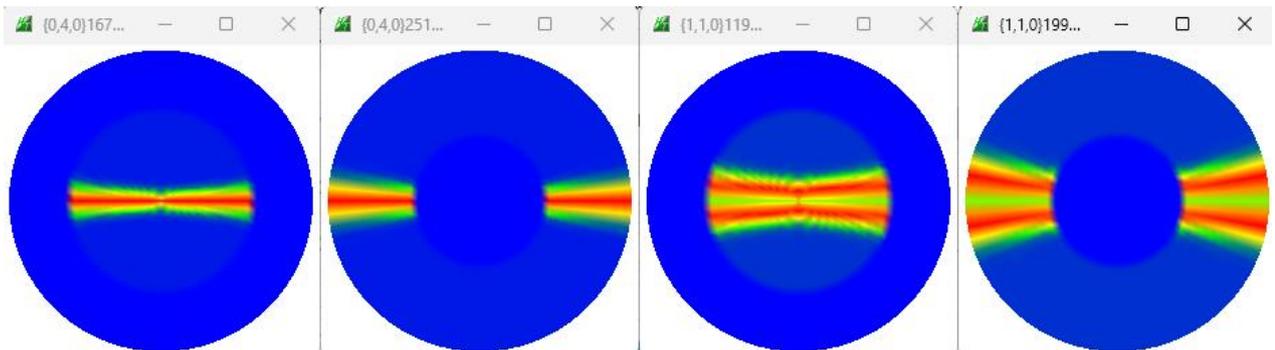
バックグラウンド除去

吸収補正

データの接続

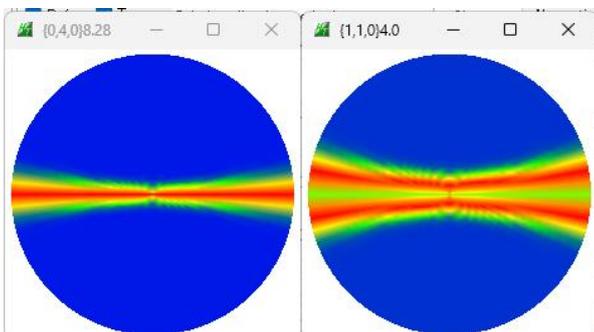
極点データ処理

The screenshot shows the ODFPoleFigure2 software interface. At the top, four circular pole figure plots are displayed, showing intensity distributions in different orientations. Below the plots is the main control panel. A yellow box highlights the 'Background delete mode' section, with a callout box containing the text 'バックグラウンド除去' (Background removal). Another yellow box highlights the 'AbsCalc' section, with a callout box containing the text '吸収補正' (Absorption correction). The 'Calc' button in the bottom right corner is circled in red. The status bar at the bottom indicates 'CTRHome : C:' and 'Select crystal : Monoclinic 25/07/31'.



透過反射極点図の結合

A close-up of the software interface buttons. The 'Connect' button is circled in red, indicating the next step in the process.



極点処理完了

配向関数計算 (dataexpnsion)

PPOrientation (KearnsMethod) 1.06T[25/12/31] by CTR

File Help Orientation PrintScreen

Select TXT2

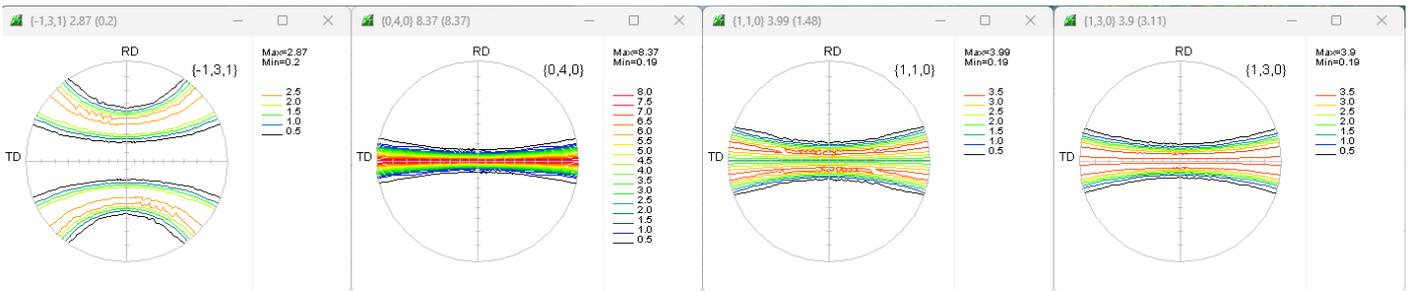
I:\Polypropylene\Rotation\REVERSE\measure\110_2-trans_chUB00__connectN_2.TXT

I:\Polypropylene\Rotation\REVERSE\measure\040_2-trans_chUB00__connectN_2.TXT

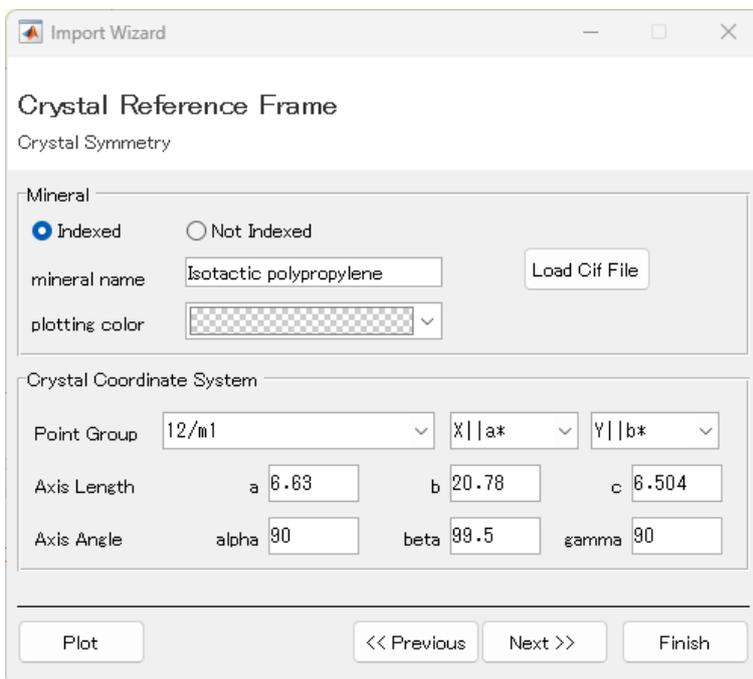
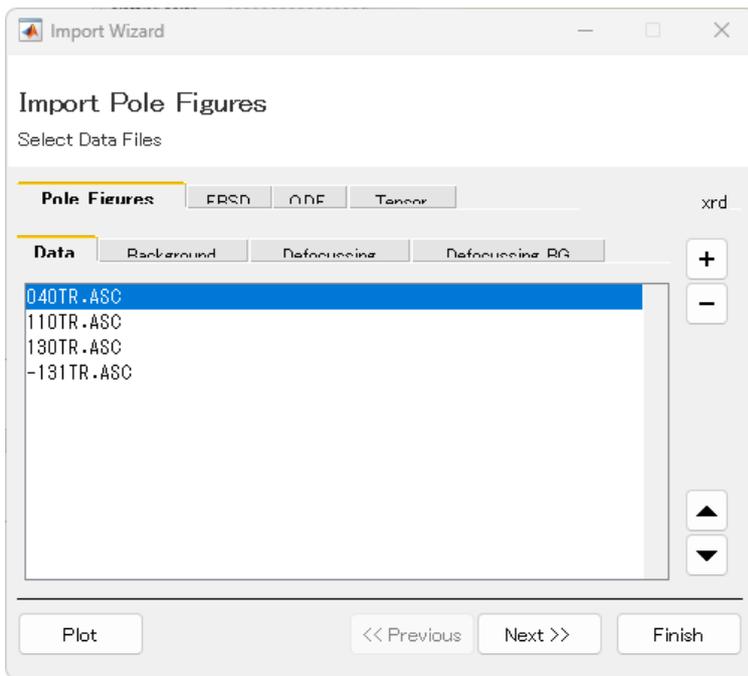
Result

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.4533	0.0936	0.4530	0.1800	-0.3595	0.1795
{040}	0.4640	0.0720	0.4639	0.1960	-0.3919	0.1958
a-axis	0.4522	0.0957	0.4519	0.1784	-0.3563	0.1779
b-axis	0.4640	0.0720	0.4639	0.1960	-0.3919	0.1958
c-axis	0.0837	0.8321	0.0841	-0.3744	0.7482	-0.3738

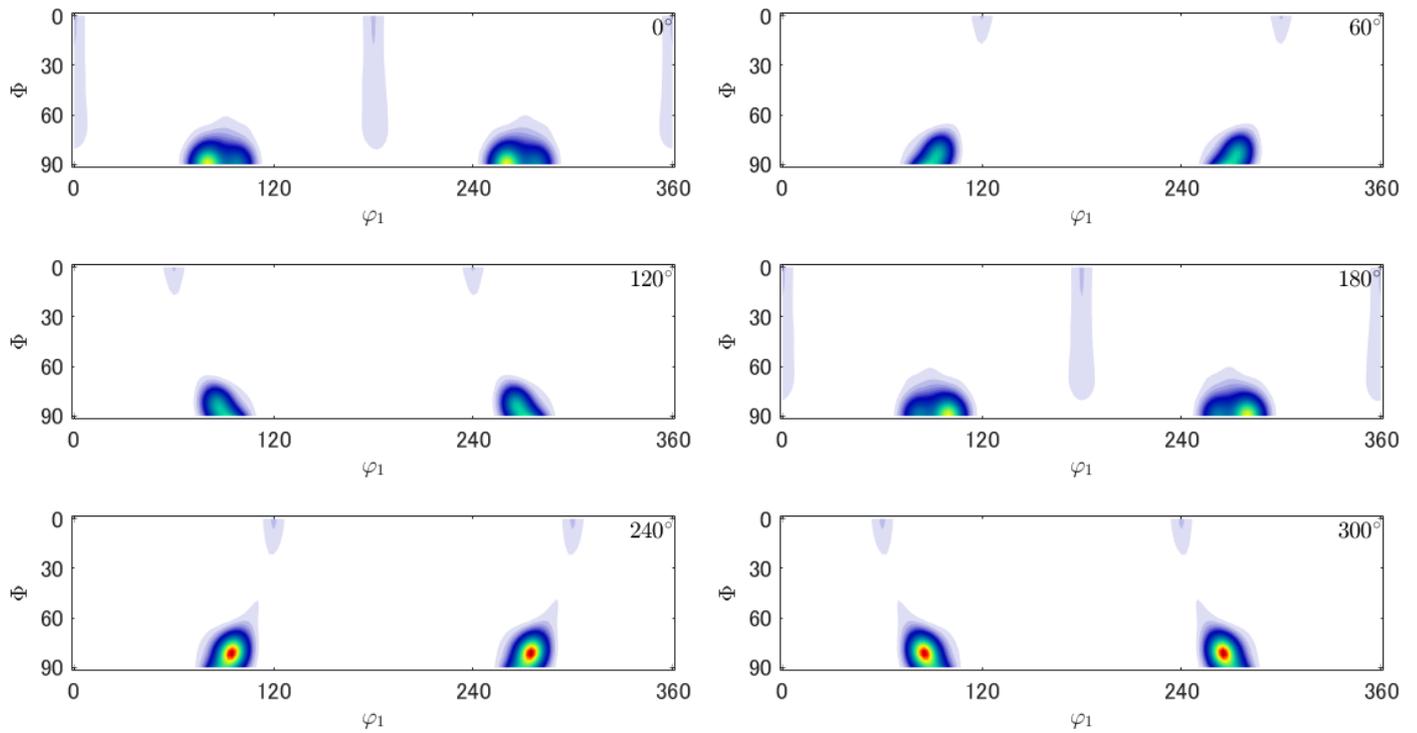
配向関数計算をMTEXで評価し CTR と比較する
MTEX入力データ作成



MTEX入力



ODF 計算



[0 0 1] に対する ND, RD, TD の配向計算

```
>> k=calcKearnsFactor(odf,zvector)
```

```
k =
```

```
0.1238
```

```
>> k=calcKearnsFactor(odf,xvector)
```

```
k =
```

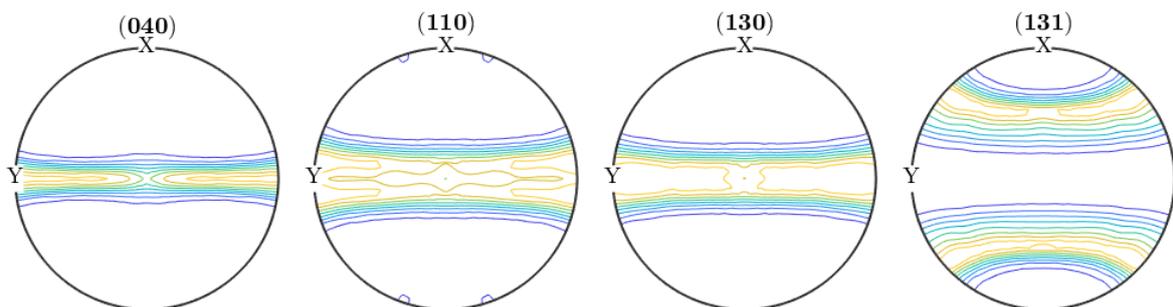
```
0.7627
```

```
>> k=calcKearnsFactor(odf,yvector)
```

```
k =
```

```
0.1134
```

再計算極点図



{040} と {110} を Export し、CTR で計算

CTRと比較

The screenshot shows the PPOrientation software interface. The title bar reads "PPOrientation (KearnsMethod) 1.06T[25/12/31] by CTR". The menu bar includes "File", "Help", "Orientation", and "PrintScreen".

Under "Select TXT2", two files are listed:

- {110} I:\Polypropylene\Rotation\MTEX\110_txt-rp_2.TXT
- {040} I:\Polypropylene\Rotation\MTEX\040_txt-rp_2.TXT

Below the file list are five buttons: "PoleDisp", "ContourDisp", "{110}Orientation", "{040}Orientation", and "Calc".

The "Result" section contains a table with the following data:

direction	ND	RD	TD	fnd	frd	ftd
{110}	0.4225	0.1335	0.4439	0.1338	-0.2997	0.1659
{040}	0.4557	0.0999	0.4443	0.1835	-0.3501	0.1665
a-axis	0.4192	0.1368	0.4439	0.1288	-0.2947	0.1658
b-axis	0.4557	0.0999	0.4443	0.1835	-0.3501	0.1665
c-axis	0.1250	0.7632	0.1117	-0.3124	0.6448	-0.3324

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

	MTEX	CTR
c-ND	0.1238	0.1250
c-RD	0.7627	0.7632
c-TD	0.1134	0.1117

ほぼ一致する。