

PEシリーズ1

補正の必要がない Polyethylene 極点図の ODF 解析比較

吸収や defocus が必要のない極点図の ODF 解析結果

	LaboTexRp%		CTRRp%					平均	最大方位密度	VF%	VF%Error
	Rp%	dRp%	{020}	{110}	{200}	{311}					
完全極点図	2.19	11.79	2.3	1.7	1.4	2.4	1.9	<b>84.017</b>	<b>50</b>	11.118	
反射極点図	1.23	2.15	0.1	0.4	0	1.8	0.5	<b>99.759</b>	<b>49</b>	16.261	
透過極点図	1.14	0.24	0.1	0.2	0.2	0.3	0.2	<b>84.644</b>	<b>48</b>	13.738	

VolumeFraction の期待値は 50% に対し、どの極点図でもほぼ同一結果が得られます。

実際の極点図の場合、バックグラウンド、吸収、defocus の問題があります。

次回に評価してみます。

2019年09月22日

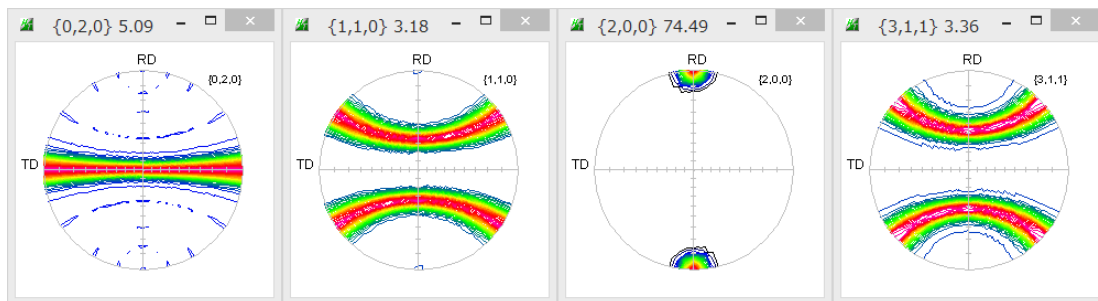
*HelperTex Office*

高分子材料の極点測定では、反射極点図、等価極点図が測定され、透過極点図と反射極点図を接続し完全極点図による ODF 解析が行われている。

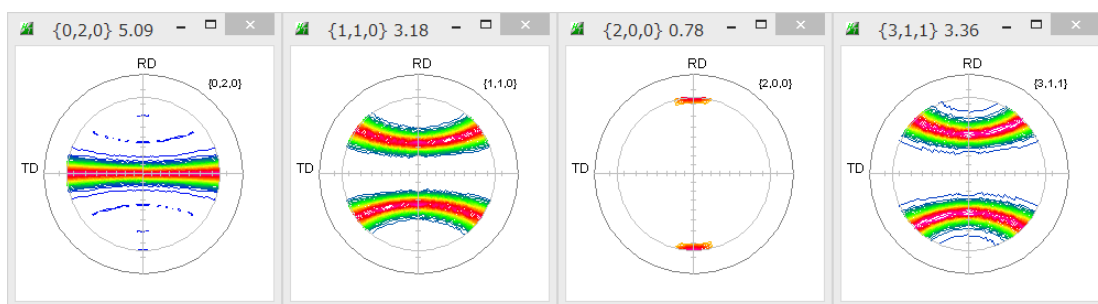
本資料では  $\langle 020 \rangle$  Fiber 極点図 (面配向 VolumeFraction 50%) を作成し

TD 軸回転(90度)から軸配向極点図を作成し、完全極点図、反射極点図、透過極点図の ODF 解析を比較する。極点図は吸収や defocus の影響を受けていない比較である。

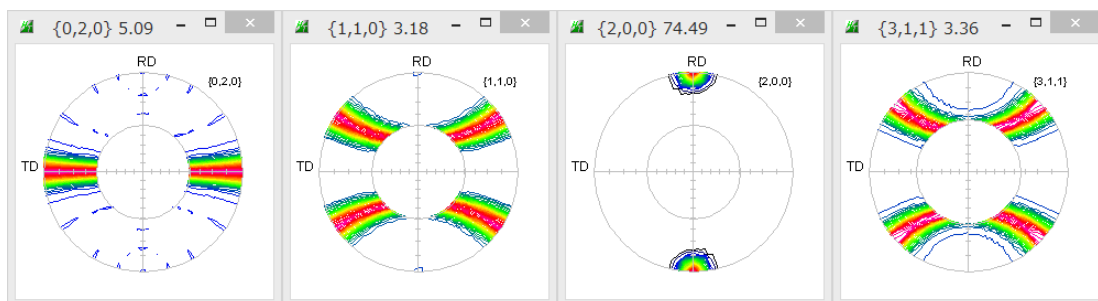
完全極点図(LaboTex で  $\langle 020 \rangle$  Fiber (面配向) を作成し PFRotation で TD 軸 90 度回転極点図)



反射極点図



等価極点図



上記極点図のODF解析結果の VolumeFraction の期待値は各々 50%である。

ODF 解析として LaboTex を用いるが、LaboTex は軸配向に対応していないため、ODF 解析結果を軸配向から面配向にして VolumeFraction 解析を行う。

LaboTex では軸の取り方が異なるため、PE 極点図の指数が異なります。

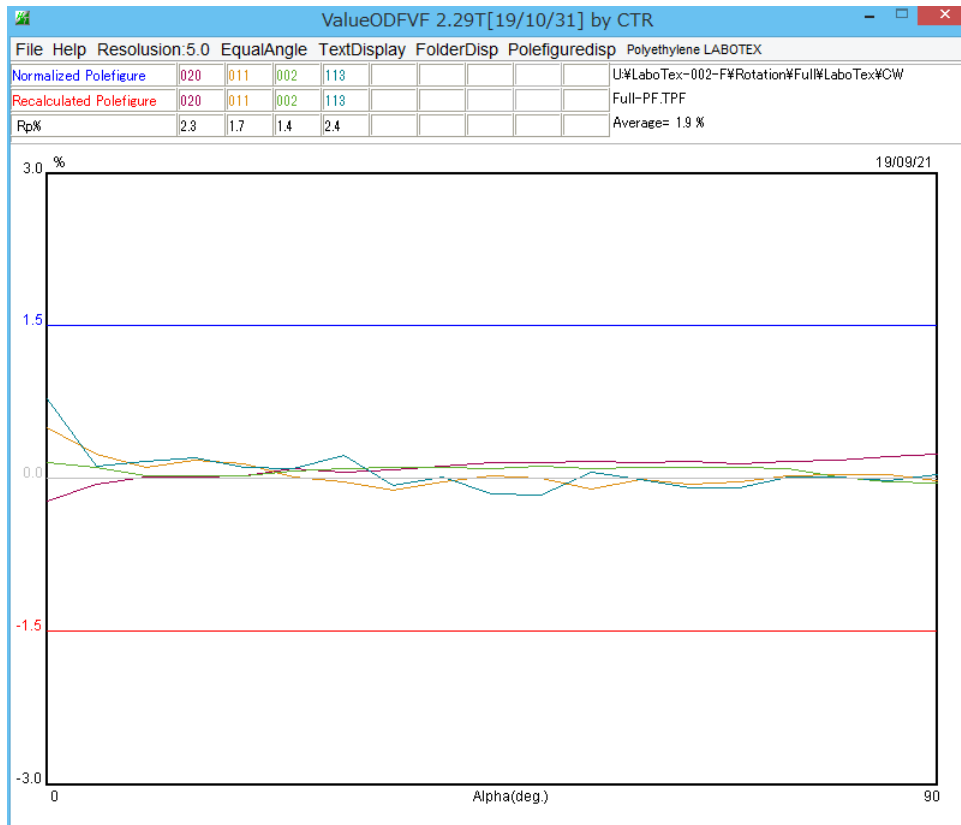
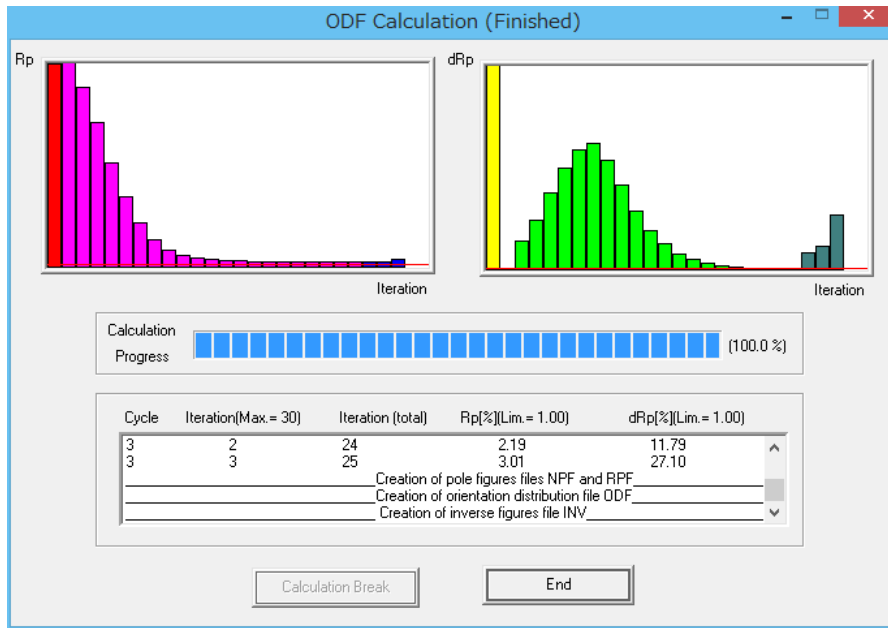
1	1	0	0	1	1
2	0	0	0	0	2
2	1	0	0	1	2
0	2	0	0	0	0
0	1	1	1	1	1
3	1	0	0	1	3
1	1	1	1	1	1
2	2	0	0	0	2
3	1	1	1	1	3

➔

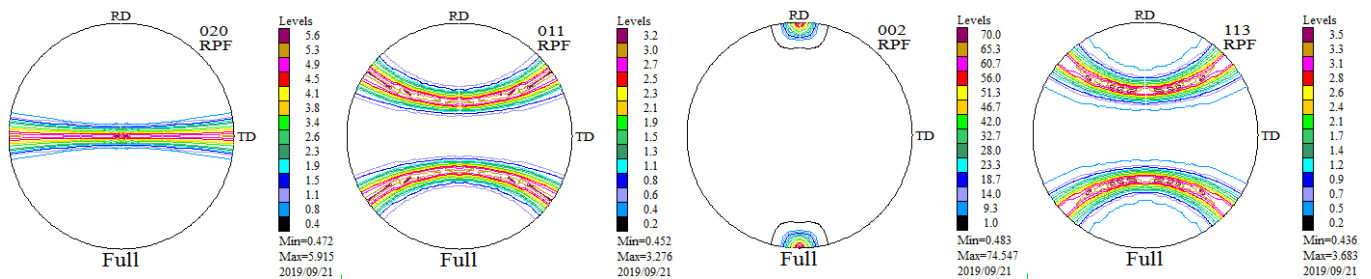
0	1	1
0	0	2
0	1	2
0	2	0
1	1	0
0	1	3
1	1	1
0	2	2
1	1	3

完全極点図を LaboTex で解析

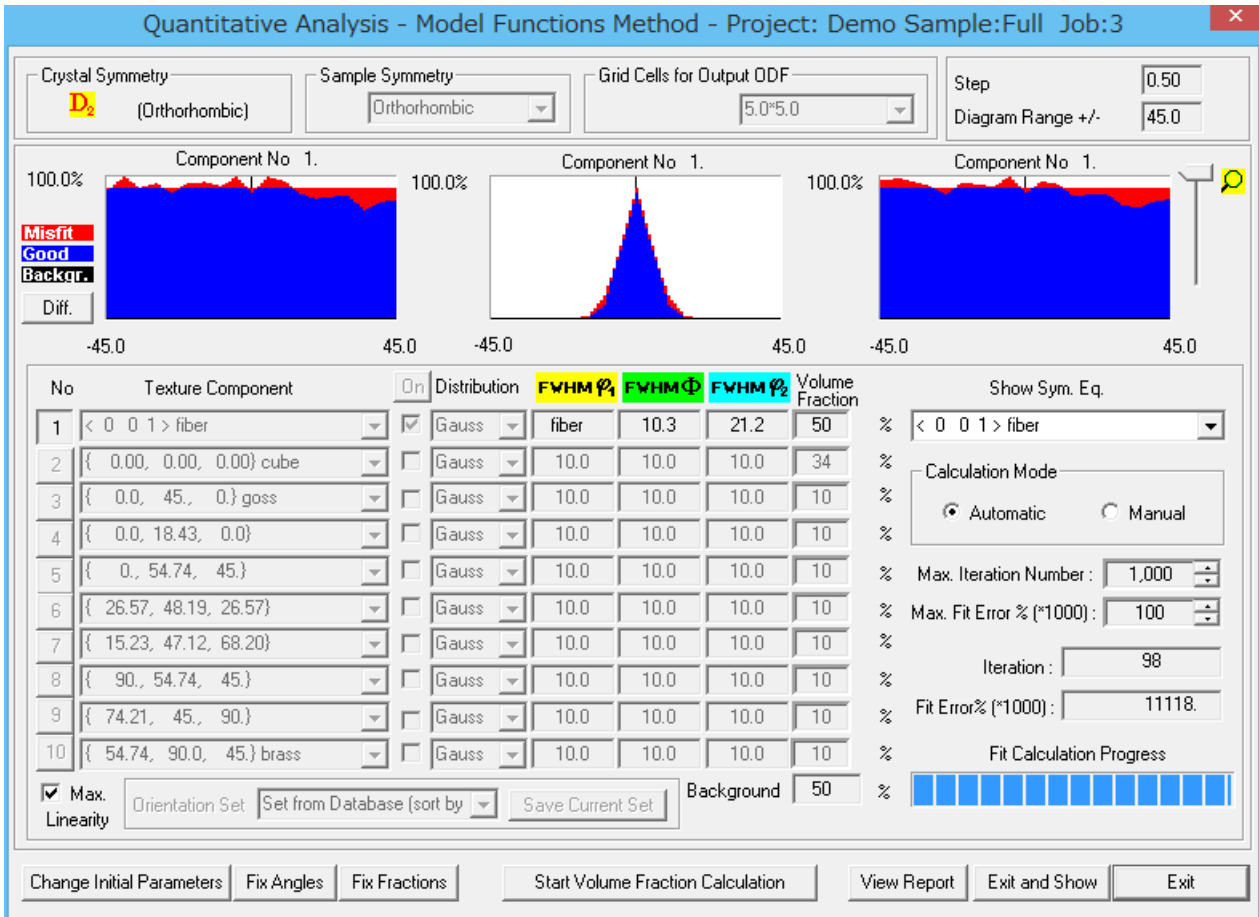
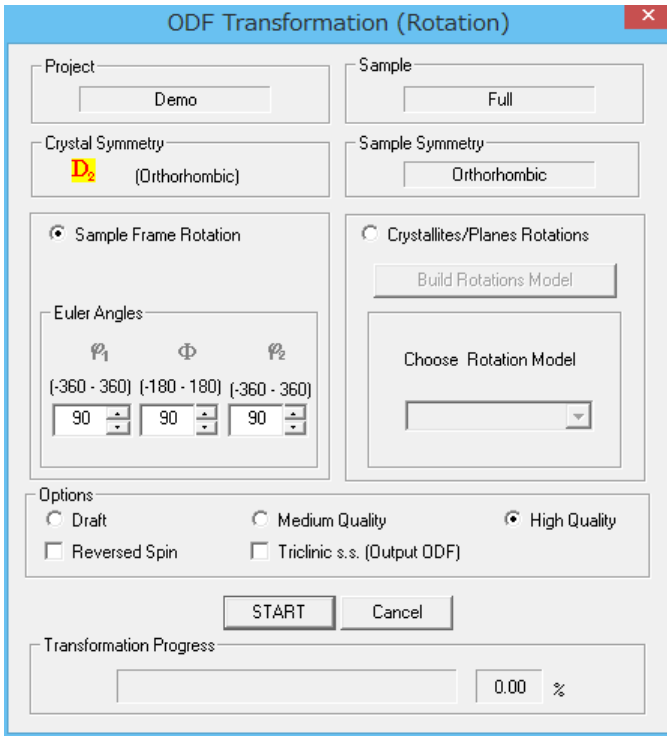
# Error 評価



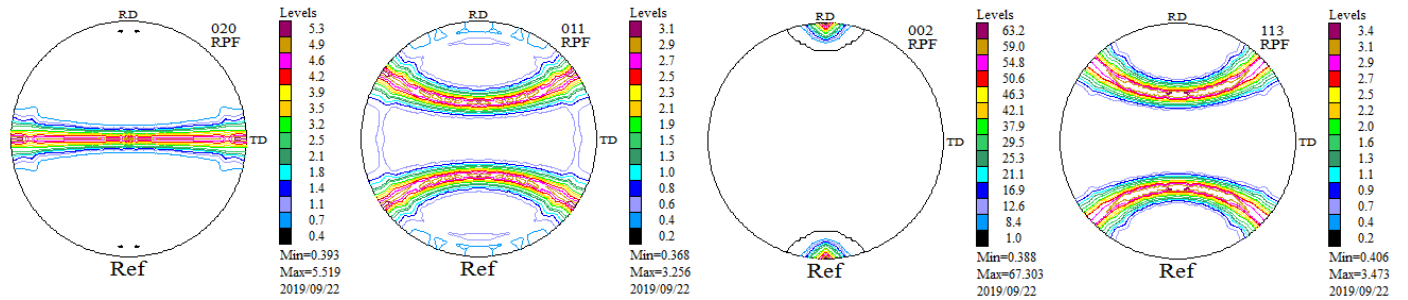
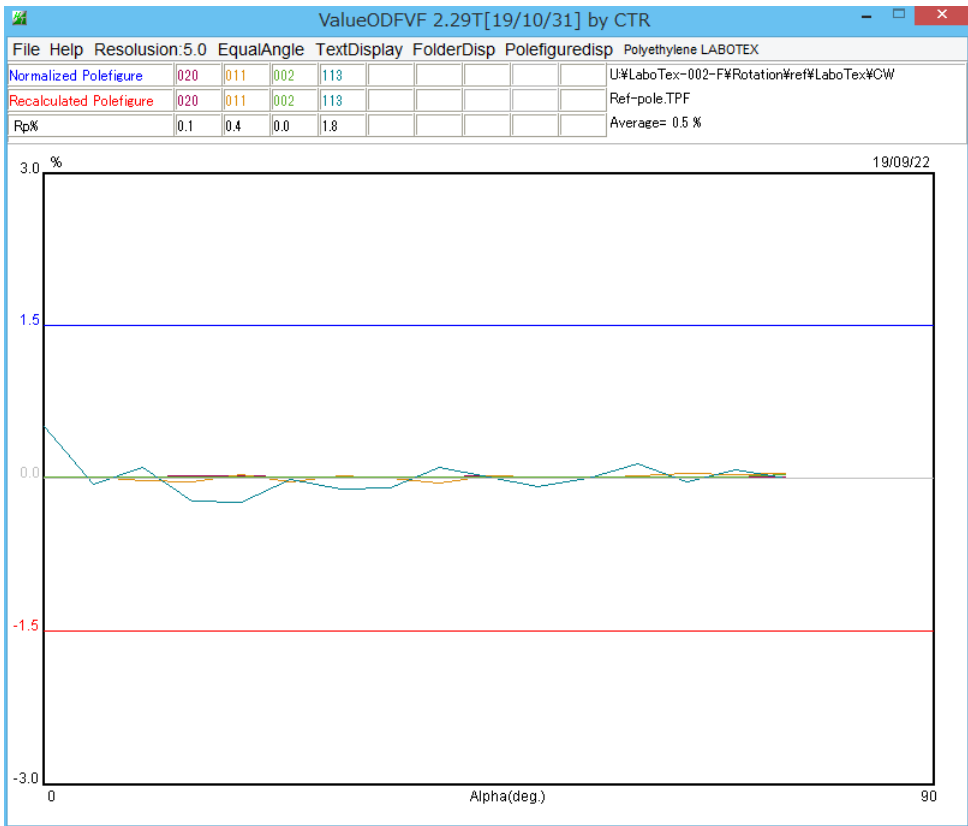
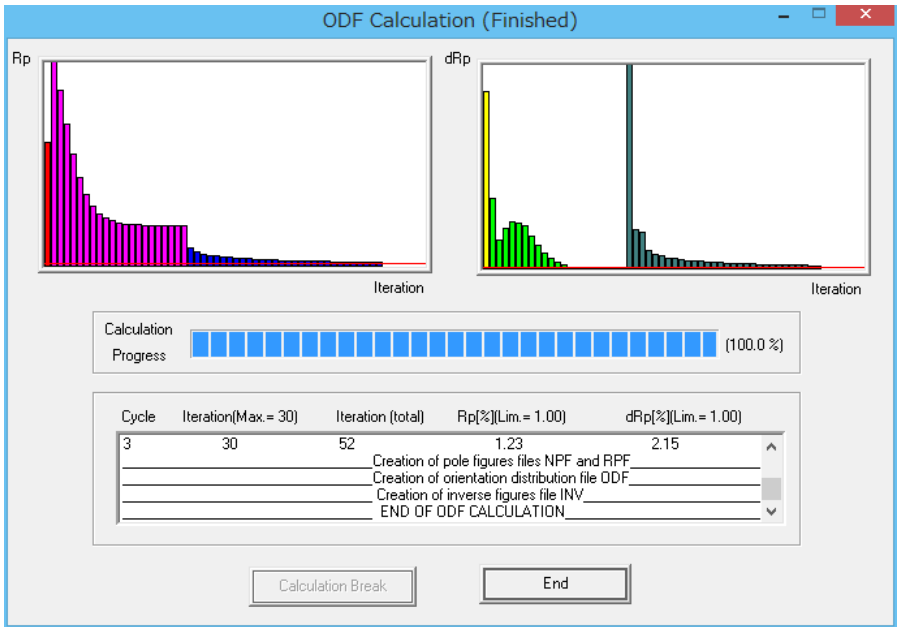
## 再計算極点図



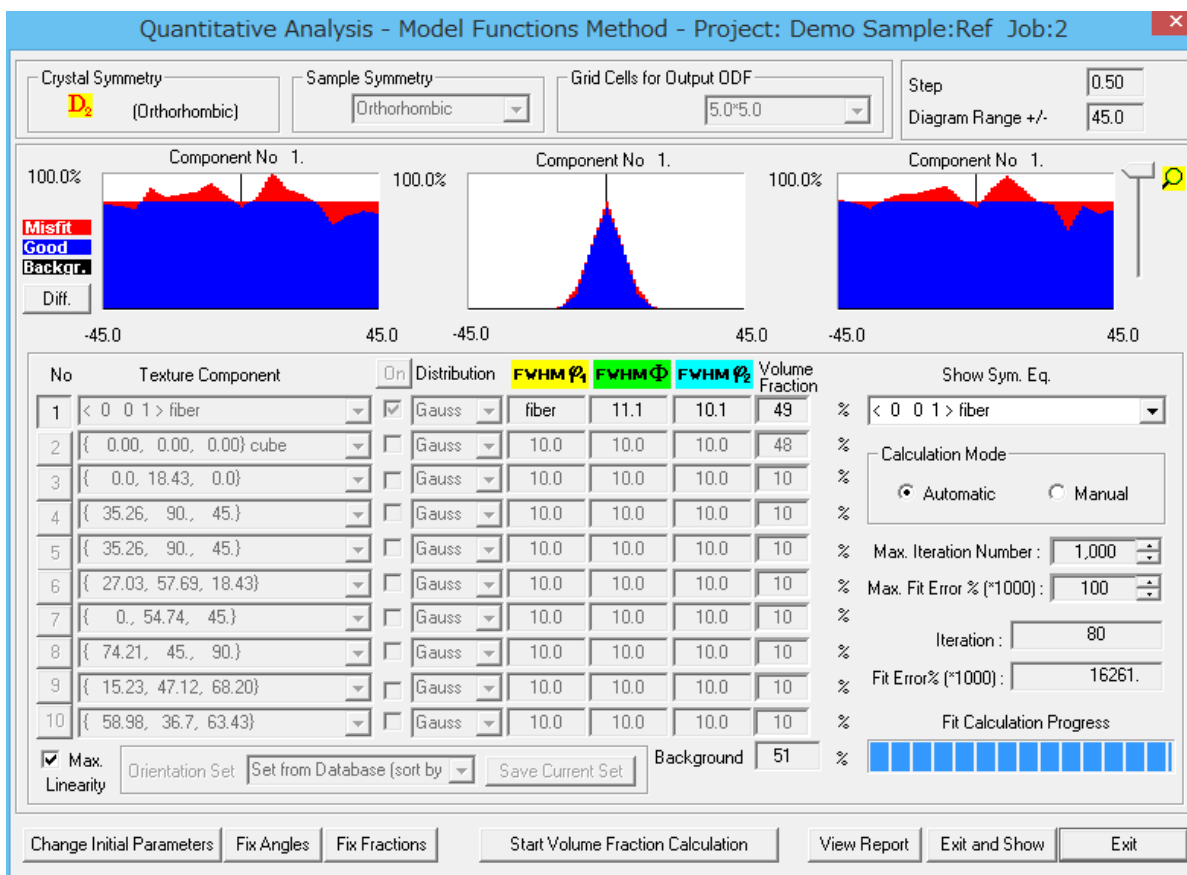
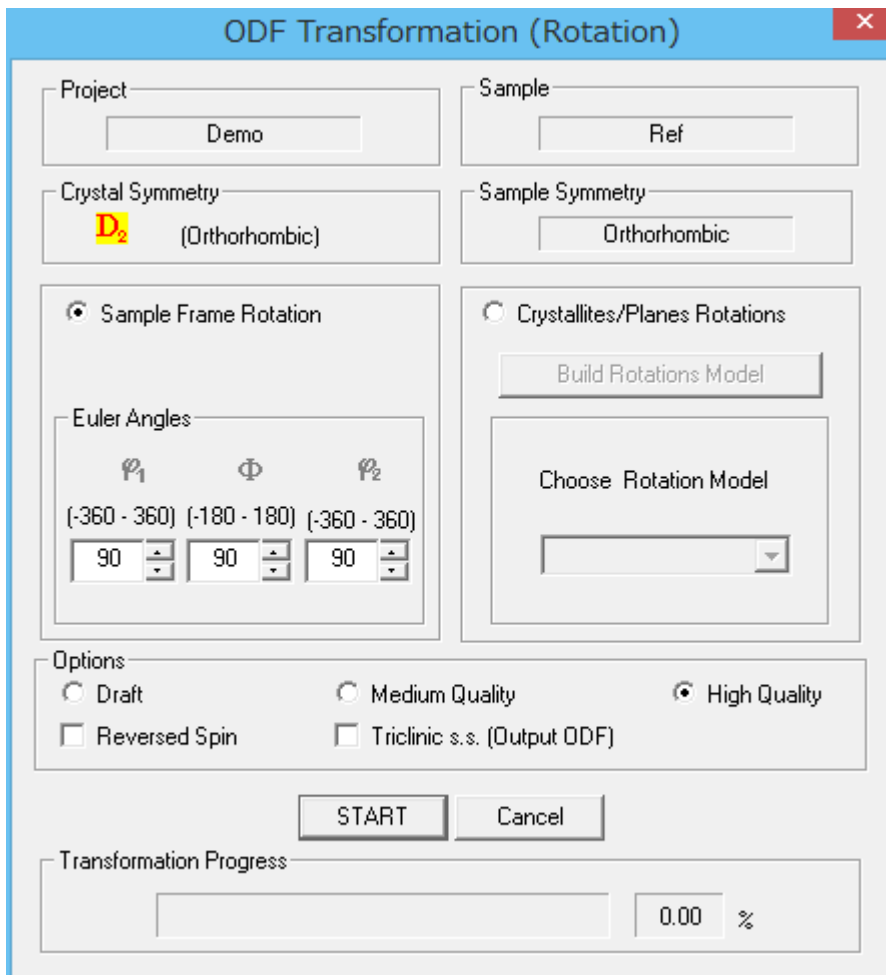
軸配向から面配向に変換し VolumeFraction 計算



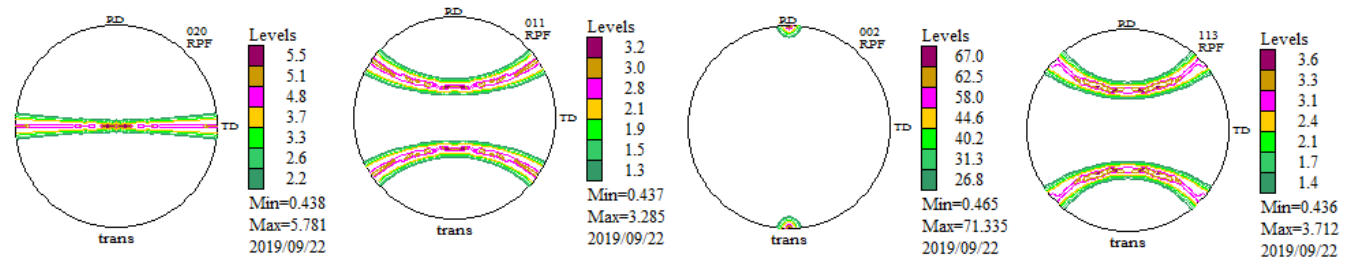
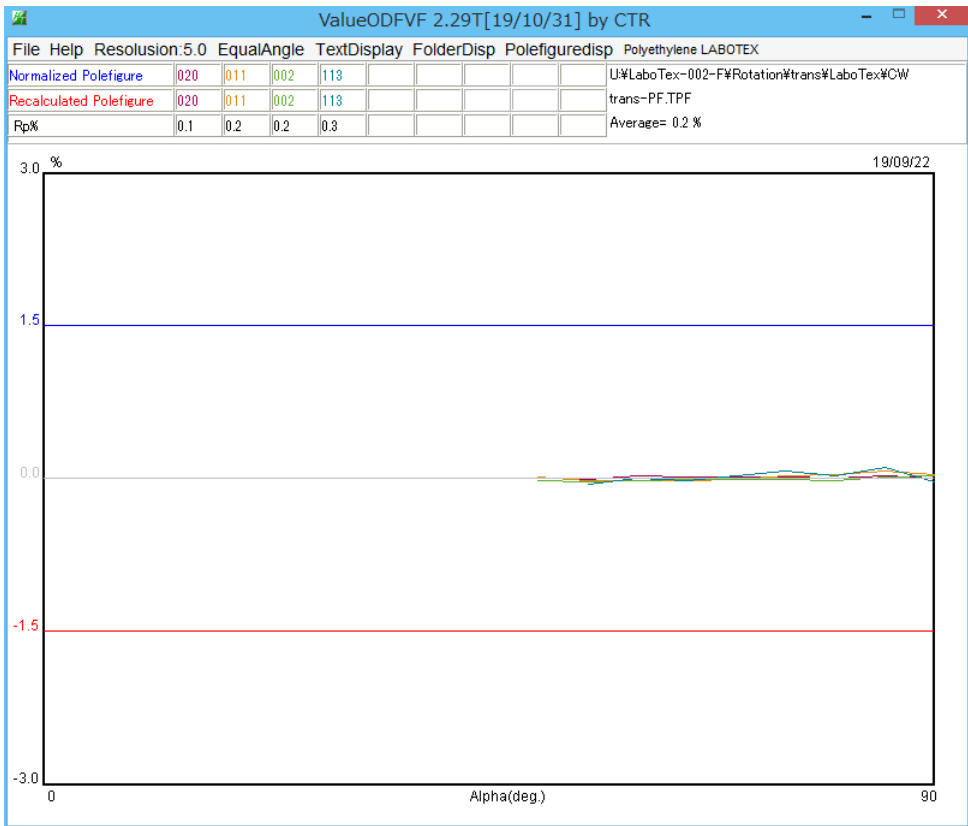
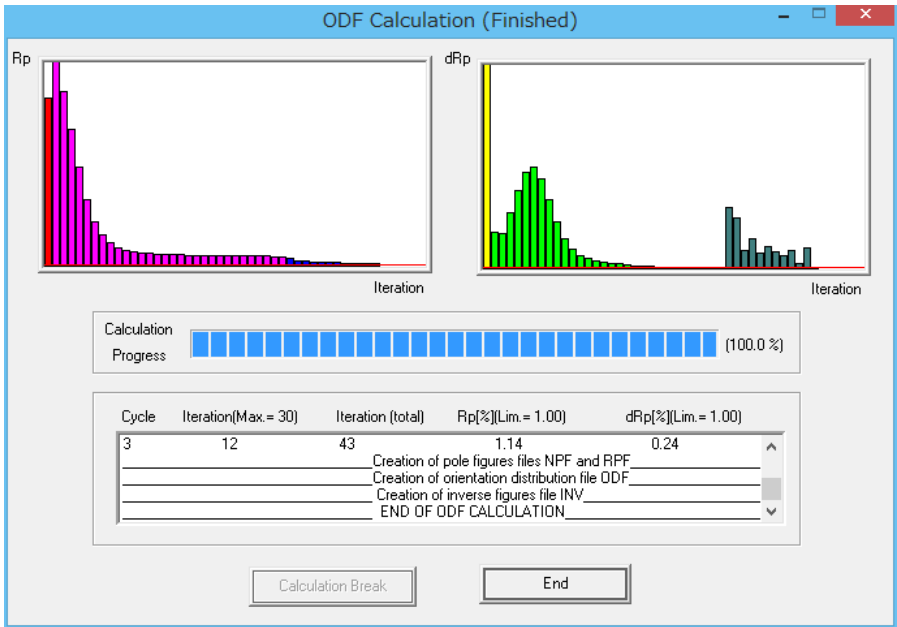
反射極点図を L a b o T e x で解析



軸配向から面配向に変換し VolumeFraction 計算



透過法極点図をL a b o T e x で解析



軸配向から面配向に変換し VolumeFraction 計算

### ODF Transformation (Rotation)

**Project**  
Demo

**Crystal Symmetry**  
D<sub>2</sub> (Orthorhombic)

**Sample Frame Rotation**

**Euler Angles**

$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$
(-360 - 360)	(-180 - 180)	(-360 - 360)
90	90	90

**Sample**  
Ref

**Sample Symmetry**  
Orthorhombic

**Crystallites/Planes Rotations**

Build Rotations Model

Choose Rotation Model

**Options**

Draft     
  Medium Quality     
  High Quality

Reversed Spin     
  Triclinic s.s. (Output ODF)

START      Cancel

**Transformation Progress**

0.00 %

### Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:trans Job:2

**Crystal Symmetry**  
D<sub>2</sub> (Orthorhombic)

**Sample Symmetry**  
Orthorhombic

**Grid Cells for Output ODF**  
5.0\*5.0

Step: 0.50

Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 1

Misfit  
Good  
Backgr.  
Diff.

Component No. 1

Component No. 1

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\varphi_1$	FWHM $\Phi$	FWHM $\varphi_2$	Volume Fraction
1	< 0 0 1 > fiber	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	fiber	10.5	2.9	48 %
2	< 0 0 1 > fiber	<input type="checkbox"/>	Gauss	fiber	10.0	10.0	32 %
3	< 0 0 1 > fiber	<input type="checkbox"/>	Gauss	fiber	10.0	10.0	49 %
4	{ 90., 54.74, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
5	{ 0., 35.26, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 64.93, 74.5, 33.69 }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 45., 90., 0. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 52.87, 74.5, 33.69 }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 54.74, 90.0, 45. } brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 74.21, 45., 90. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
<input checked="" type="checkbox"/> Max. Linearity                      Orientation Set: Set from Database (sort by)                      Save Current Set                      Background: 52							

**Show Sym. Eq.**  
 < 0 0 1 > fiber

Calculation Mode:  
 Automatic     Manual

Max. Iteration Number: 1,000

Max. Fit Error % (\*1000): 100

Iteration: 79

Fit Error% (\*1000): 13738

Fit Calculation Progress

Change Initial Parameters

Fix Angles

Fix Fractions

Start Volume Fraction Calculation

View Report

Exit and Show

Exit