

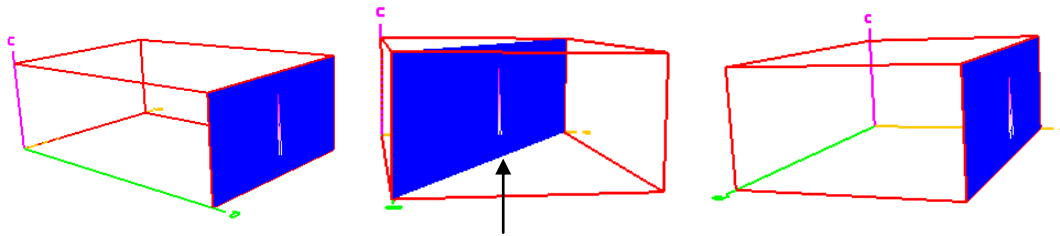
C軸がMD軸平行度評価

## Polyethylene 1軸配向の配向評価

1軸配向評価の定量性を、ODFのVolumeFractionから極点図を作成し、VolumeFractionの%と配向分布関数と配向関数の比較を行った結果、十分に相関がある事が分かります。

この結果は、理想の極点図であって、実際の測定では非結晶によるバックグラウンドの上昇部分を正確に差し引かなければならず、測定は難しくなると想定されます。

VolumeFraction	FWHM	配向分布関数 frd	配向関数 frd
40%	10deg	0.3891	0.3984
80%	10deg	0.7804	0.7846
40%	20deg	0.3708	0.3731
80%	20deg	0.7434	0.7426



MD方向がC軸方向と一致

結晶方位の定量が可能になります。

2016年03月07日

HelperTex Office

## 概要

配向評価は、配向関数で  $\{001\}$  極点図を計算すれば評価できます。  
しかし、Polyethyleneでは  $\{001\}$  は存在していない。  
ODF解析を行えば、再計算極点図として  $\{001\}$  の計算が可能になるが、本来、ODF解析が出来ていれば、結晶方位解析は終わっているのに、配向関数は意味がありません。  
ODF解析を行わないで配向関数を計算する手段として、1軸配向の条件であれば  $\{001\}$  の配向関数が計算可能になります。

完全極点図から配向関数の計算

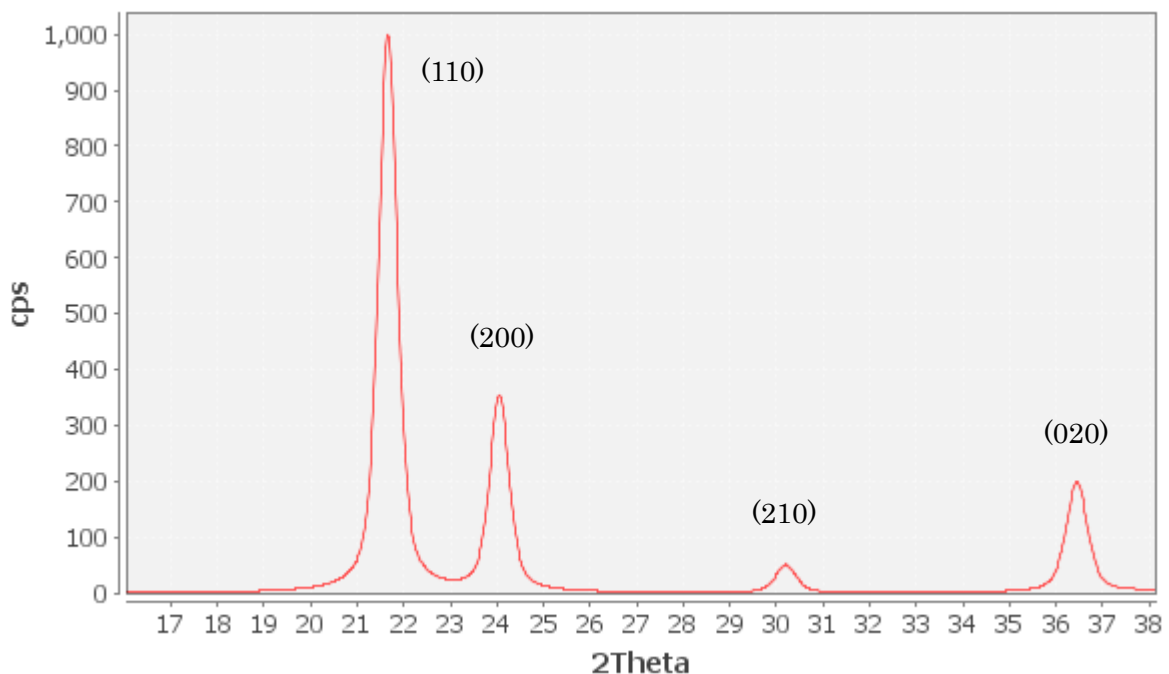
$$\frac{\int_0^{90} \int_0^{360} I_c(\alpha, \beta) \cdot \sin^2 \alpha \cdot \cos \alpha \cdot d\beta \cdot d\alpha}{\int_0^{90} \int_0^{360} I_c(\alpha, \beta) \cdot \cos \alpha \cdot d\beta \cdot d\alpha}$$

極点図の外周から配向分布関数の計算

$$\begin{aligned} \langle \cos^2 \phi_{110,z} \rangle &= \cos^2 \alpha * \langle \cos^2 \phi_{U,z} \rangle + \sin^2 \alpha * \langle \cos^2 \phi_{V,z} \rangle \\ \langle \cos^2 \phi_{200,z} \rangle &= \langle \cos^2 \phi_{U,z} \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \cos^2 \phi_{C,z} \rangle &= 1 - \langle \cos^2 \phi_{U,z} \rangle - \langle \cos^2 \phi_{V,z} \rangle \text{より} \\ \langle \cos^2 \phi_{C,z} \rangle &= 1 - \{1 + (b/a)^2\} \langle \cos^2 \phi_{110,z} \rangle \\ &\quad - \{1 - (b/a)^2\} \langle \cos^2 \phi_{200,z} \rangle \\ &= 1 - 1.44 * \langle \cos^2 \phi_{110,z} \rangle - 0.56 * \langle \cos^2 \phi_{200,z} \rangle \end{aligned}$$

Polyethylene のプロフィール



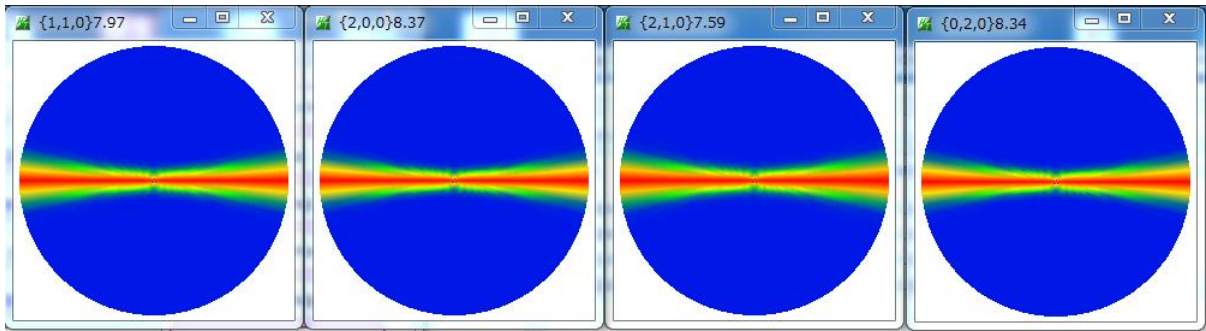
本説明に使用しているソフトウェアを含む全てのCTRパッケージソフトウェアを一定期間評価して頂く事が可能です。HelperTexサイトからご請求下さい。

CDROMで、CTRフルパッケージソフトウェア、説明書、技術資料を提供致します。  
操作方法等、不明な点があれば、ご説明致します。

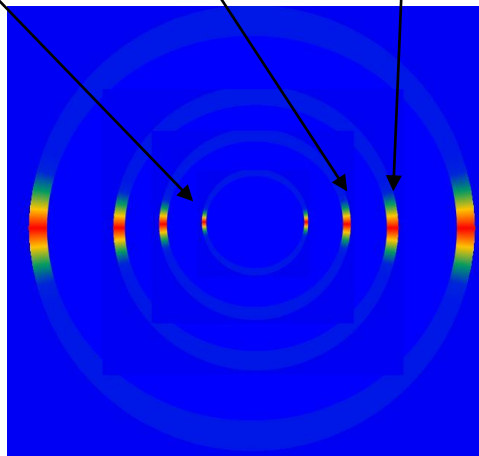
LaboTexの結晶方位シミュレーションにより

結晶方位の広がりを Gauss 関数の半価幅 10 度、20 度に対し VolumeFraction40%,80%の極点図を作成し、配向分布関数と配向関数の a 軸に対する数値を比較する。

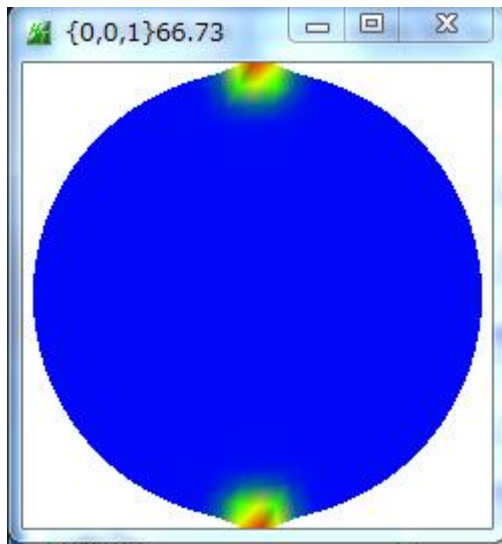
a 軸がMD方向に平行な極点図



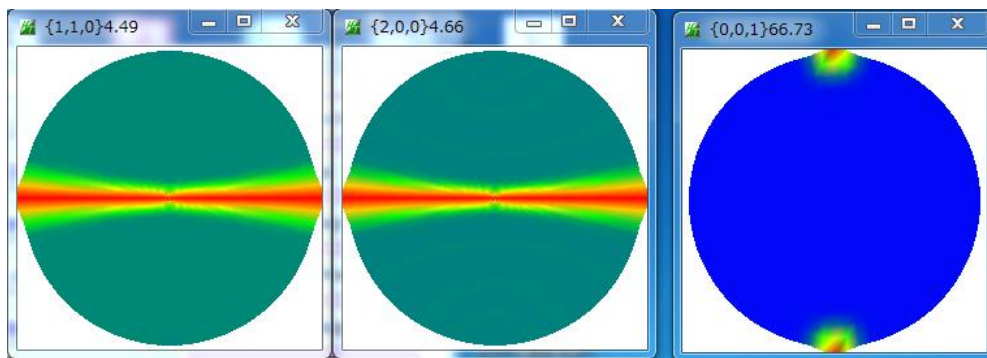
透過画面 (上記極点図から切り出し)



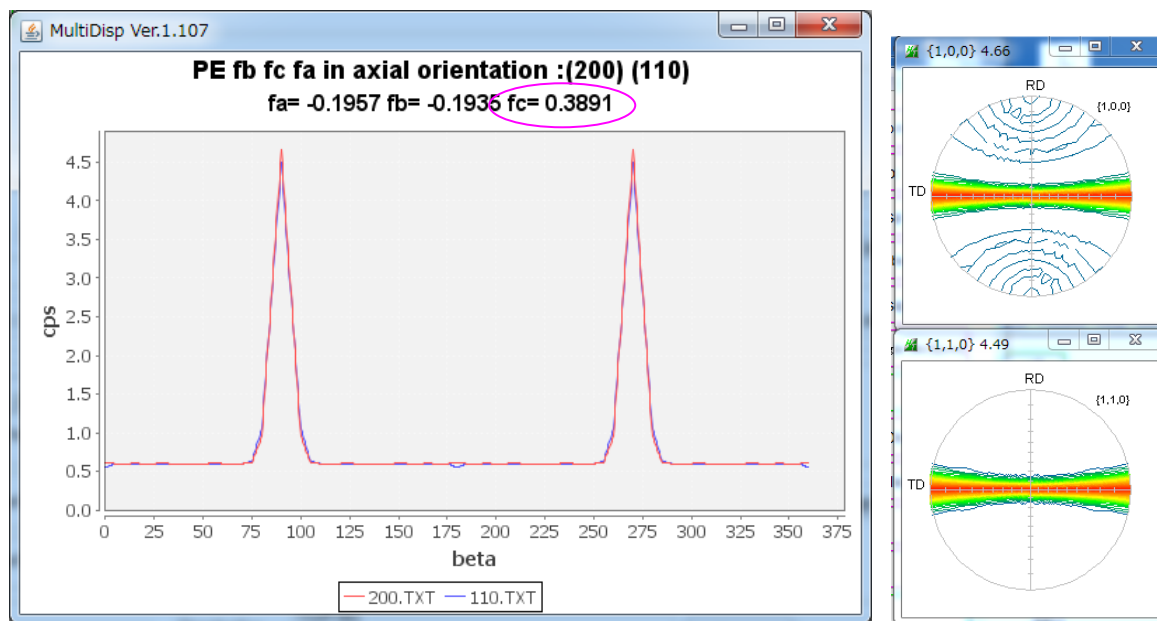
予測される{001}極点図 (実際には存在しないが比較の為作成)



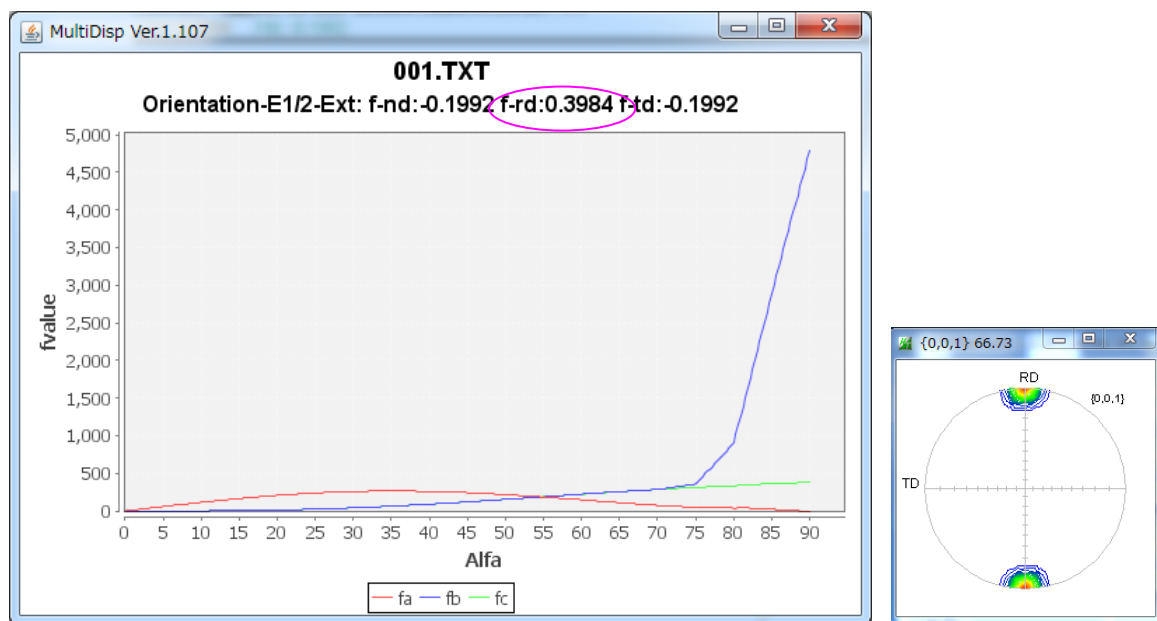
結晶方位が Euler 空間の広がり を Gauss 半価幅 10deg とし VolumeFraction40%



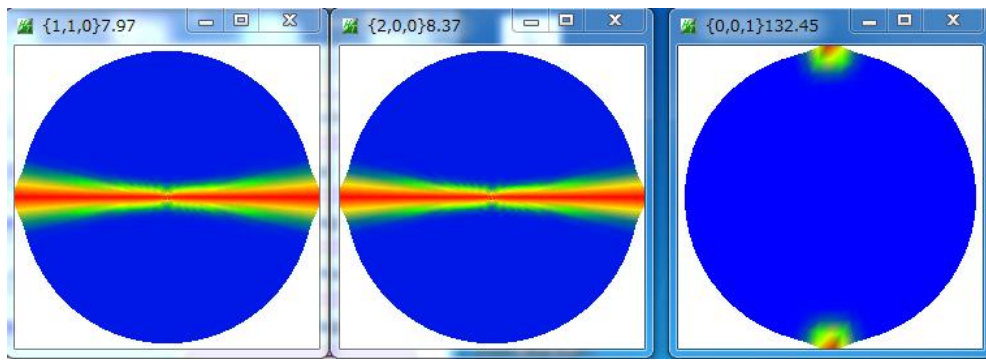
{110},{200}極点図の外周のみのβプロフィールから配向分布関数の計算



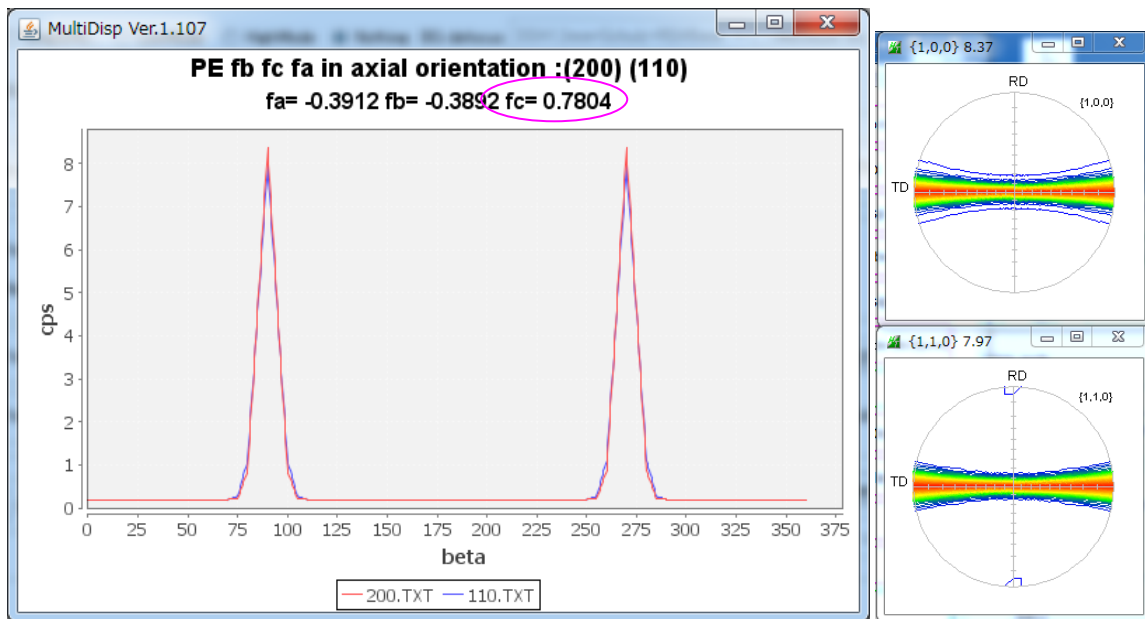
予測される極点図から配向関数の計算



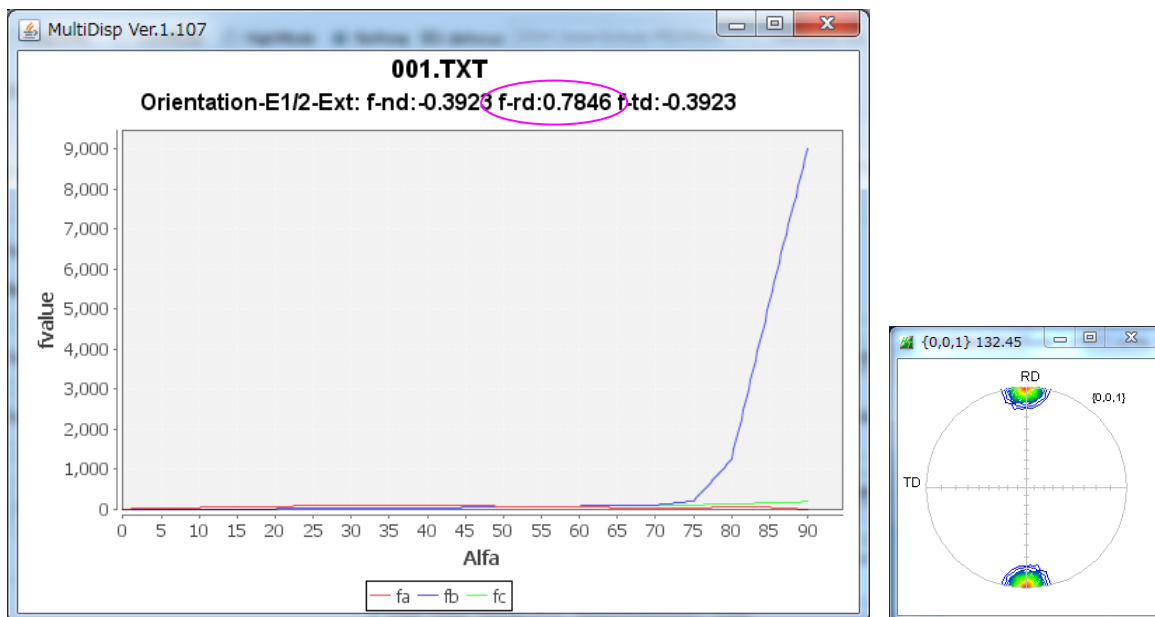
結晶方位が Euler 空間の広がり を Gauss 半価幅 10deg とし VolumeFraction80%の場合



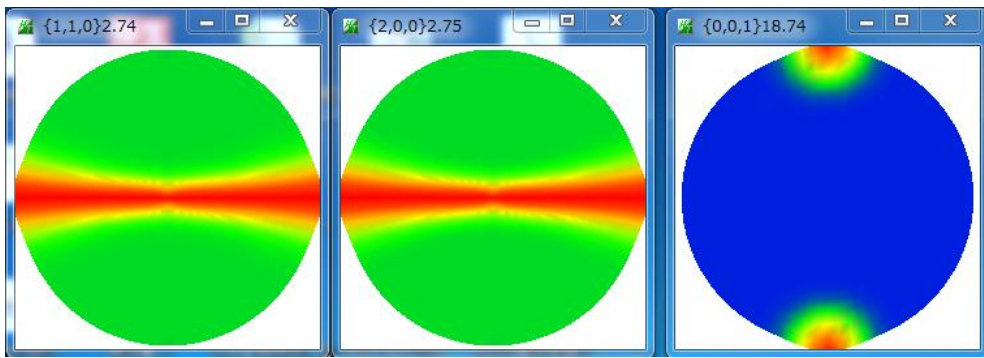
{110},{200}極点図の外周のみのβプロフィールから配向分布関数の計算



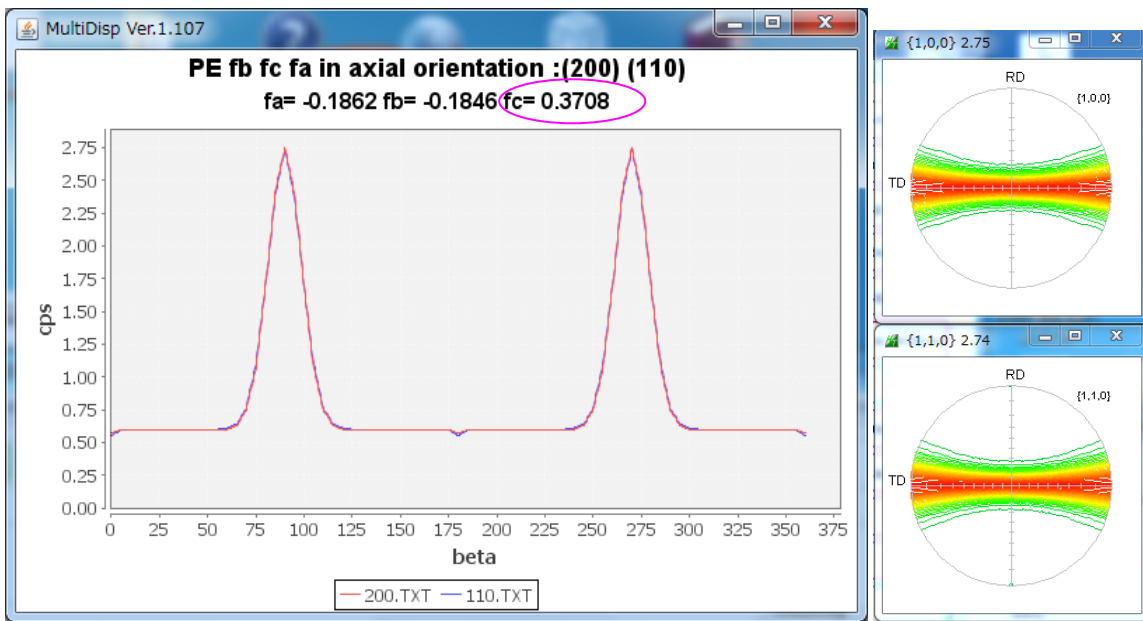
予測される極点図から配向関数の計算



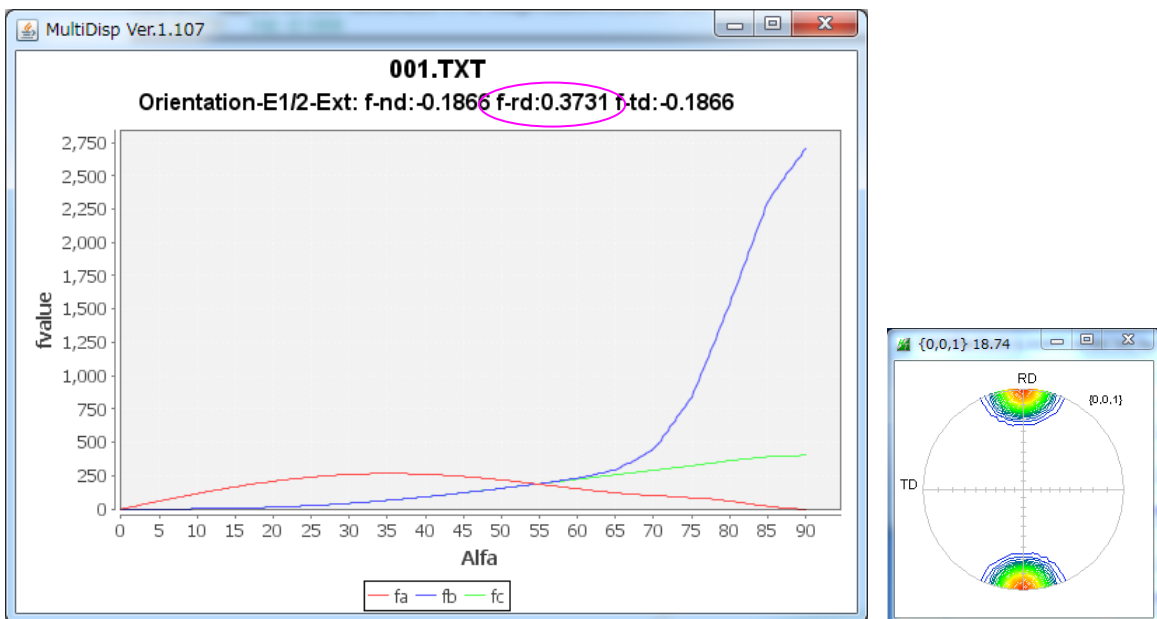
結晶方位が Euler 空間の広がり を Gauss 半幅幅 20deg とし VolumeFraction40%の場合



{110},{200}極点図の外周のみのβプロフィールから配向分布関数の計算

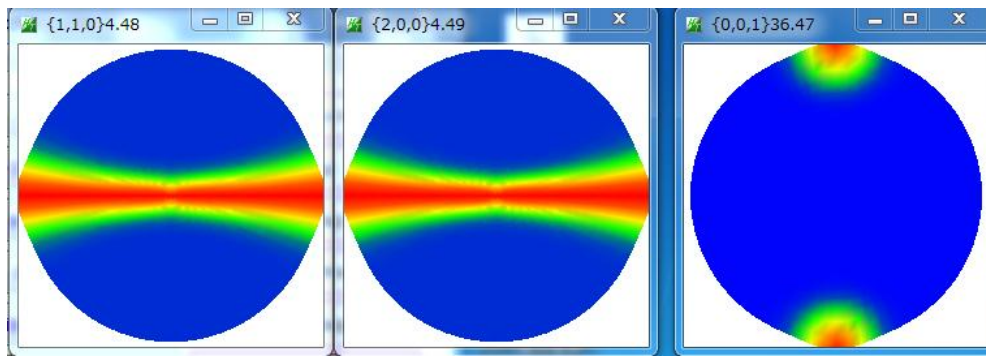


予測される極点図から配向関数の計算

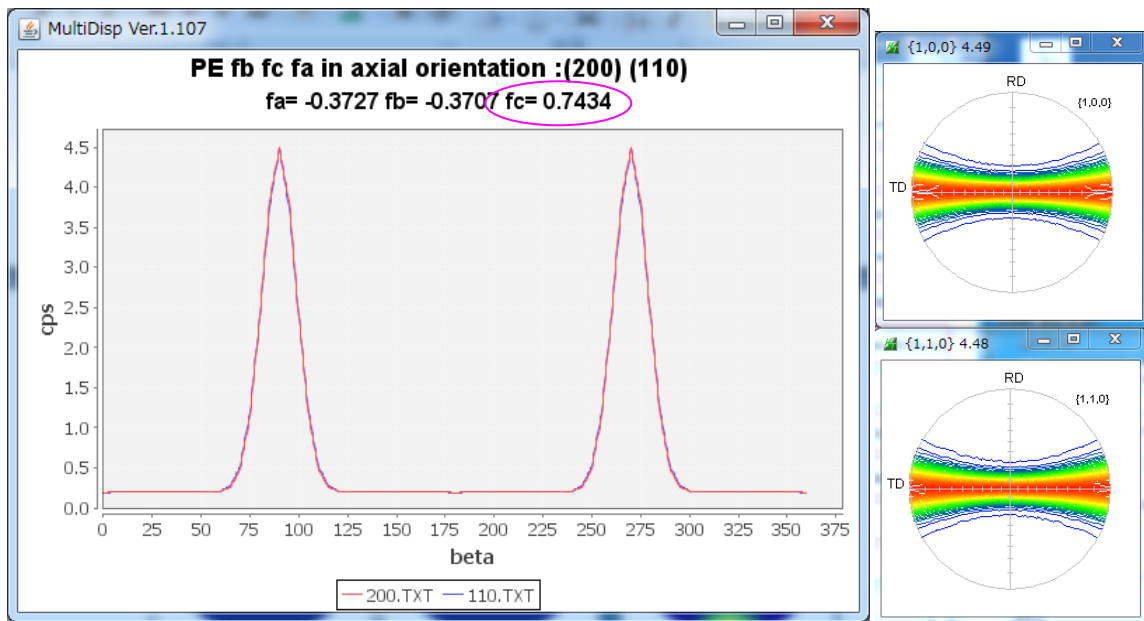




結晶方位が Euler 空間の広がり を Gauss 半価幅 20deg とし VolumeFraction80%の場合



{110},{200}極点図の外周のみのβプロフィールから配向分布関数の計算



予測される極点図から配向関数の計算

