

ポリエチレンの配向関数をシュミレーション

実際に極点図の測定出来ない<001>//C軸の配向関数をシュミレーション
ポリエチレンでは{001}の反射は存在しない為、直接測定は出来ません。
<001>//RDが50%+random50%の配向関数

シュミレーション結果

データ間隔、5deg, 1degのシュミレーション

解析手法	Step	入力データ	fa	fb	fc
PEOrientation	5deg	{200}Pole {110} Pole	-0.244	0.243	0.487
KearnsMethod	5deg	{002} Pole	-0.243	-0.243	0.486
FiberSimpleOrientatiopn	5deg	{200}β {110} β	-0.247	-0.248	0.495
PEOrientation	1deg	{200}Pole {110} Pole	-0.246	-0.246	0.492
KearnsMethod	1deg	{002} Pole	-0.246	-0.246	0.492
FiberSimpleOrientatiopn	1deg	{200}β {110} β	-0.248	-0.246	0.494

FiberSimpleOrientation手法の場合、defocus補正は必要ありません。
ポリプロピレンも同様のシュミレーションが可能

2019年10月13日

HelperTex Office

1. 概要

高分子材料の配向評価として配向関数を用いる事があります。

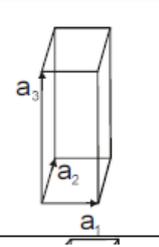
本来、複数の極点図を用いて、ODF解析すれば配向の全体像と測定のErrorが評価できますが簡易的方法として配向関数を利用しています。

シミュレーションとして、 $\langle 001 \rangle // RD$ を想定し

Volume Fraction 50%、Gauss関数で広がりを10degとして極点図を作成し配向関数計算をシミュレーションします。

極点図は、LaboTexで作成し、極点図をExportして極点図から配向関数を計算比較してみます。

2. LaboTexでは、a軸<b軸<c軸の制限があります。

Orthorhombic	D_2	D_{2h}, D_2	$a < b < c$	$90^\circ \ 90^\circ \ 90^\circ$	
	C_2	C_{2v}			

このため、LaboTexでODF解析する場合、本来の格子定数と指数が変わります。

```

PolyethyleneDISP
Orthorhombic
7.4      (1.0)
4.93     (0.6662)
2.54     (0.3432)
90.0
90.0
90.0
1.54056
9
1      1      0      100.0      4.1029      21.642
2      0      0      35.0       3.7         24.032
2      1      0      5.0        2.9593      30.175
0      2      0      20.0       2.465       36.418
0      1      1      25.0       2.2579      39.893
3      1      0      20.0       2.206       40.875
1      1      1      20.0       2.1596      41.792
2      2      0      15.0       2.0514      44.109
3      1      1      25.0       1.6655      55.095
00-053-1859      Polyethylene      Formula: ( C2 H4 )n      が
  
```

LaboTexで扱おうと

```

PolyethyleneDISP
Orthorhombic
2.54     (1.0)
4.93     (1.9409)
7.4      (2.9134)
90.0
90.0
90.0
1.54056
9
0      1      1      100.0      4.1029      21.642
0      0      2      35.0       3.7         24.032
0      1      2      5.0        2.9593      30.175
0      2      0      20.0       2.465       36.418
1      1      0      25.0       2.2579      39.893
0      1      3      20.0       2.206       40.875
1      1      1      20.0       2.1596      41.792
0      2      2      15.0       2.0514      44.109
1      1      3      25.0       1.6655      55.095
00-053-1859      Polyethylene      Formula: ( C2 H4 )n
  
```

3. 解析における各種パラメータの変更

極点図（格子定数、指数とデータ回転方向の変更）

CTR → LaboTex

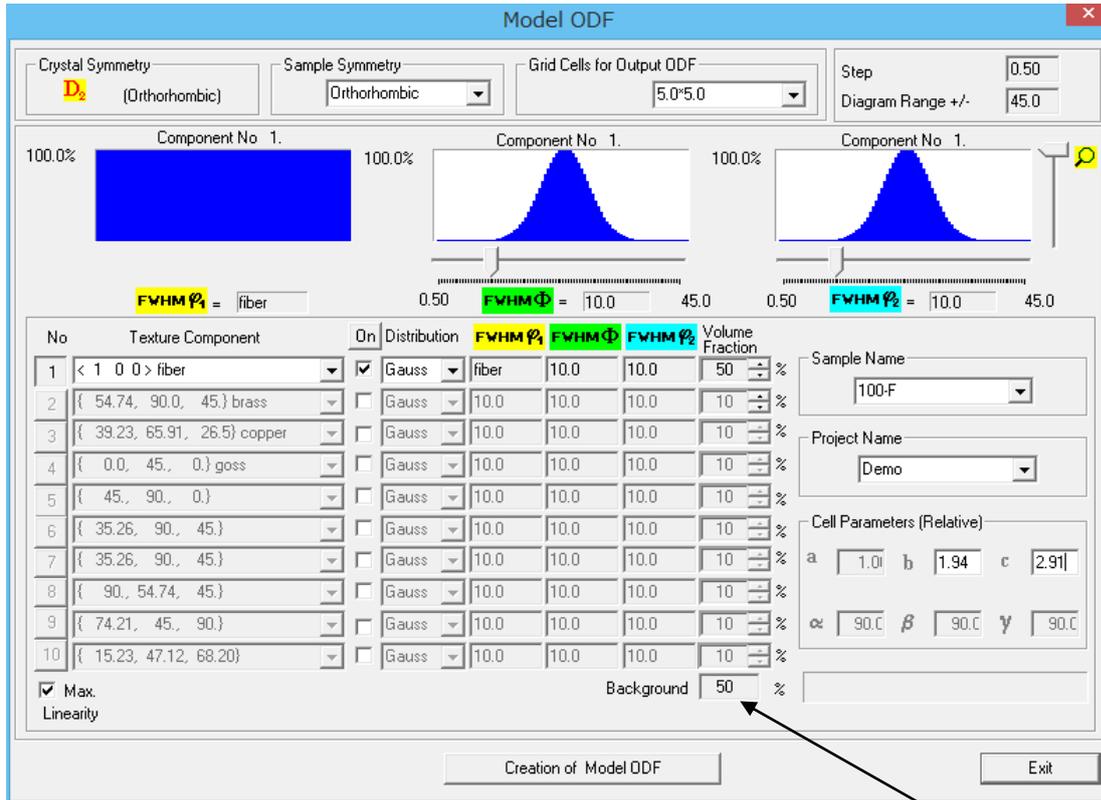
PF to ODF 3 ソフトウェアで変更

LaboTex → CTR

Make Pole File ソフトウェアで変更

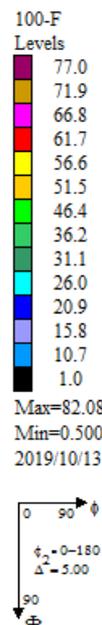
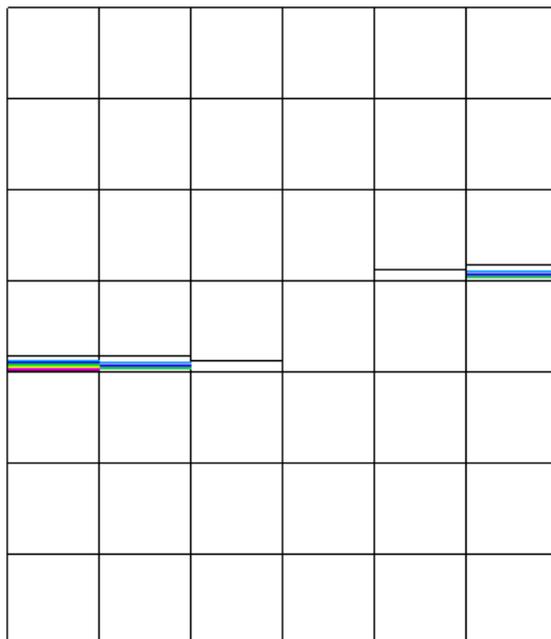
4. C 軸面配向データの作成

LaboTex s では a 軸面配向

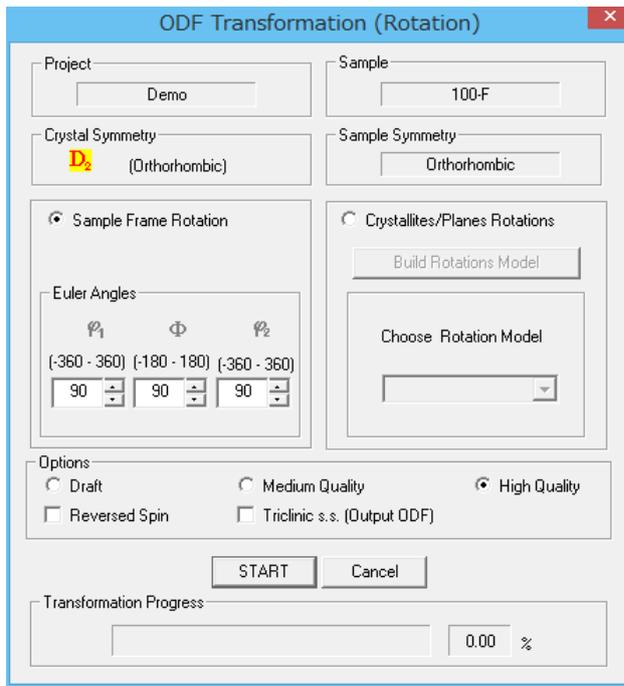


作成されるODF図

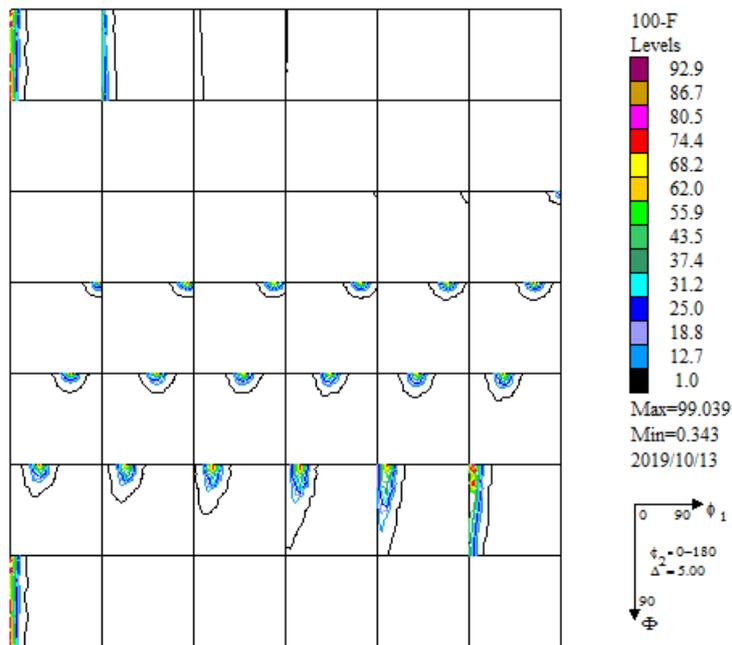
random 50%



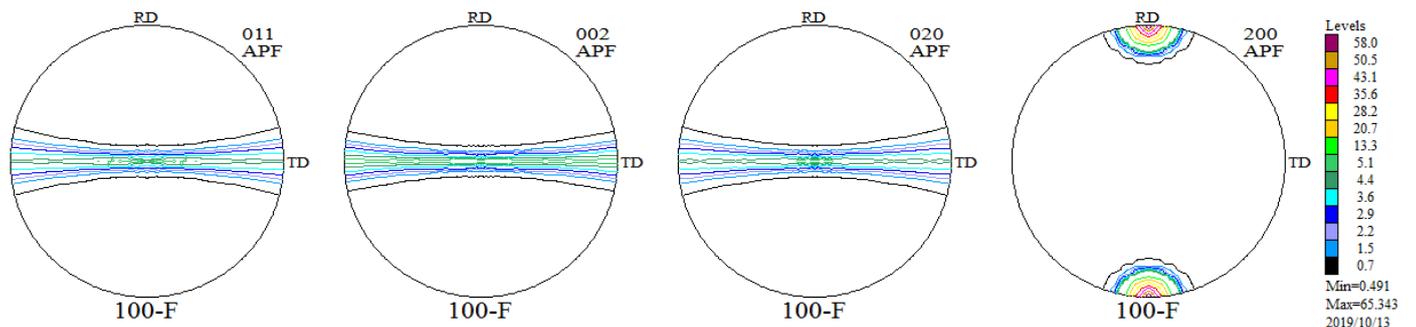
5. 面配向から軸配向に変換



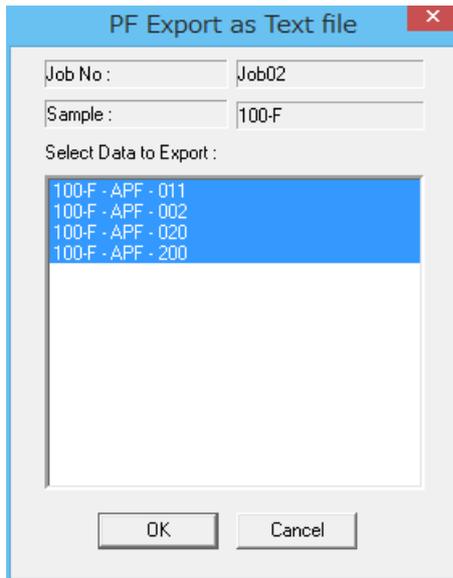
回転したODF図



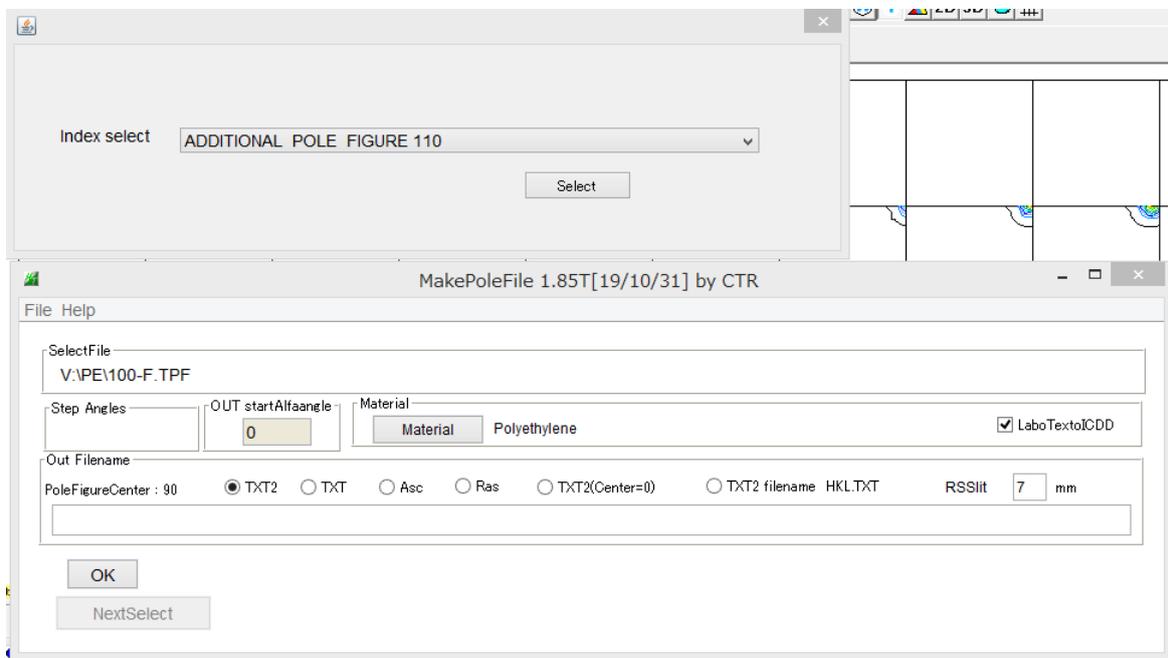
ODF図から極点図作成



6. 極点図の E x p o r t



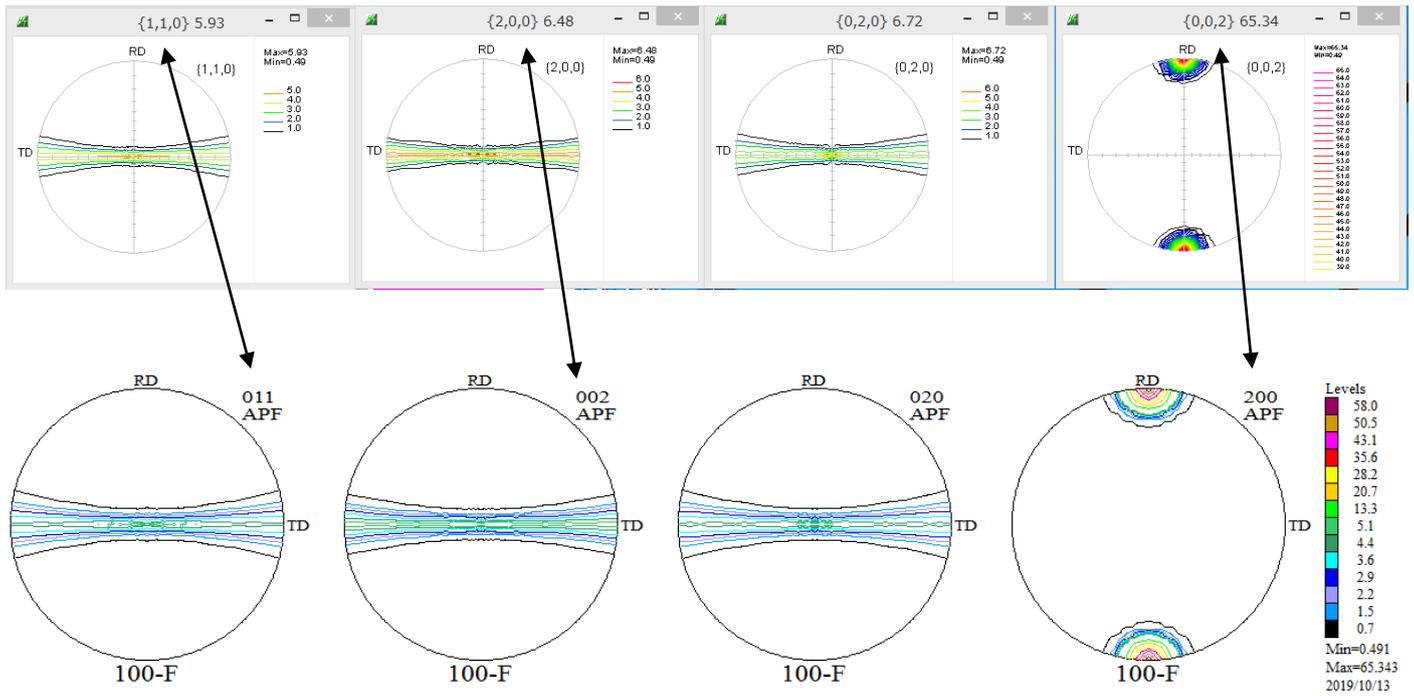
L a b o T e x 極点図から T X T 2 ファイル作成



作成されるファイル

002_labotexCW-rp_2.TXT	2019/10/13 9:52	テキスト文書	22 KB
100-F-200.TPF	2019/10/13 9:51	TPF ファイル	3 KB
020_labotexCW-rp_2.TXT	2019/10/13 9:47	テキスト文書	22 KB
200_labotexCW-rp_2.TXT	2019/10/13 9:47	テキスト文書	22 KB
110_labotexCW-rp_2.TXT	2019/10/13 9:47	テキスト文書	22 KB
100-F.TPF	2019/10/13 9:00	TPF ファイル	10 KB

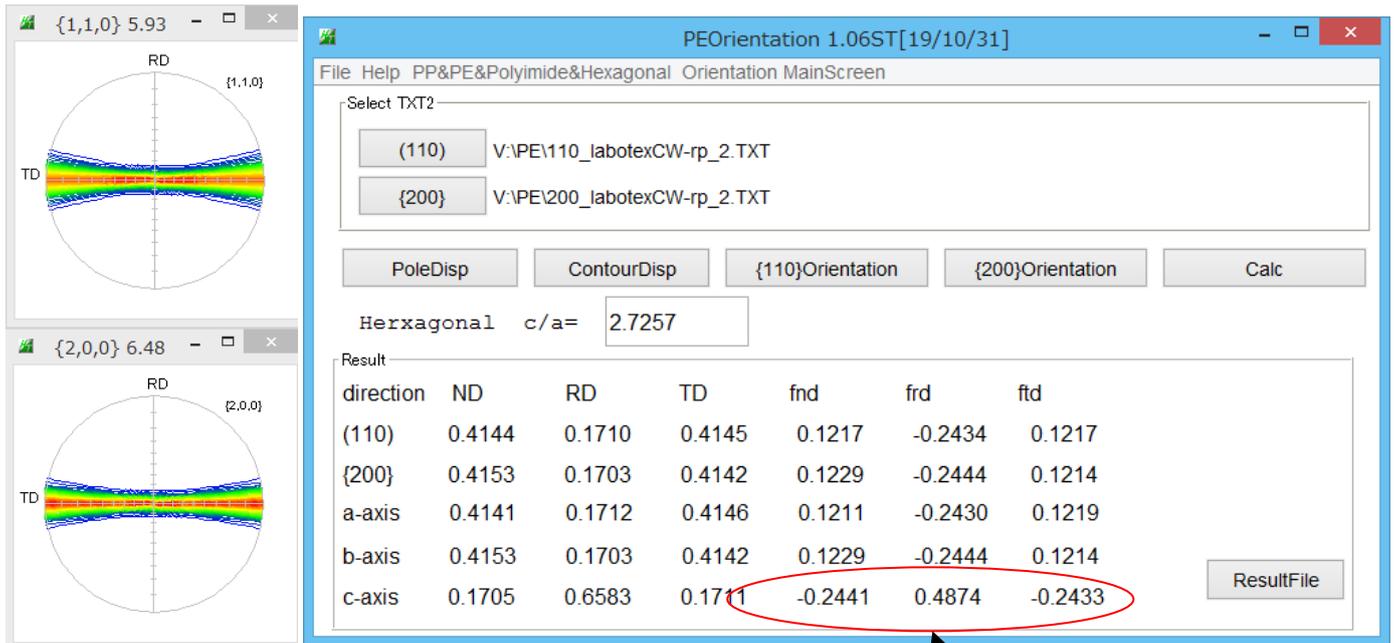
7. 極点図の比較



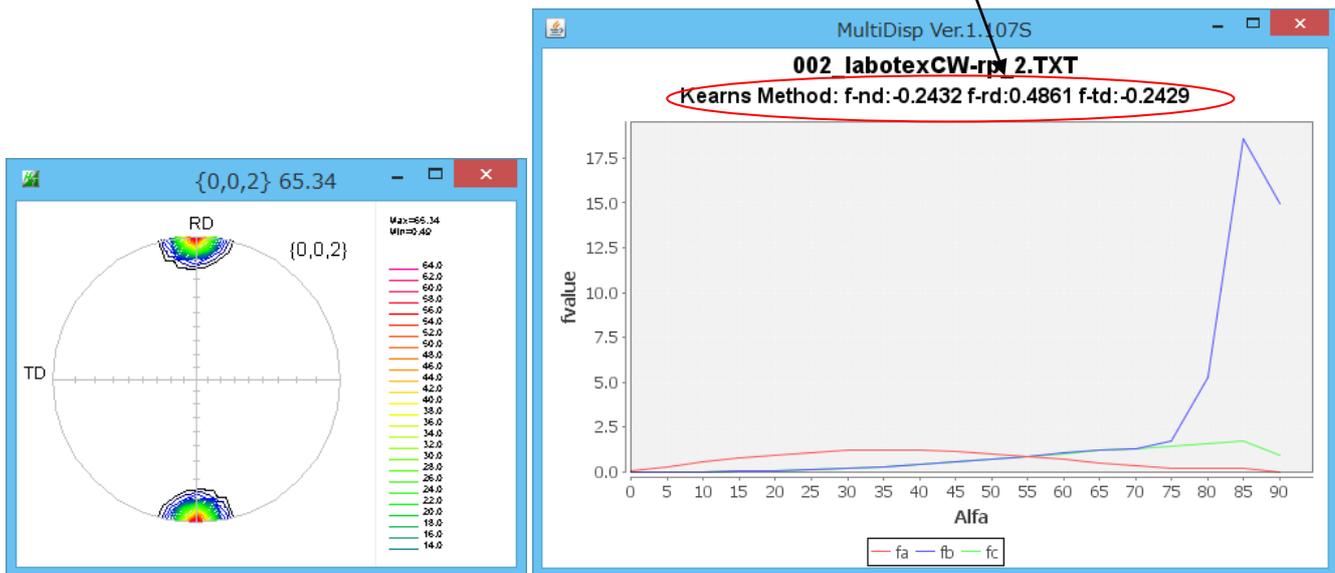
指数が変更されています。

又、{0 0 2} 極点図は実際には測定できませんが、参考に計算しています。

8. ポリエチレン {110} と {200} 極点図から測定できないC軸の配向関数計算



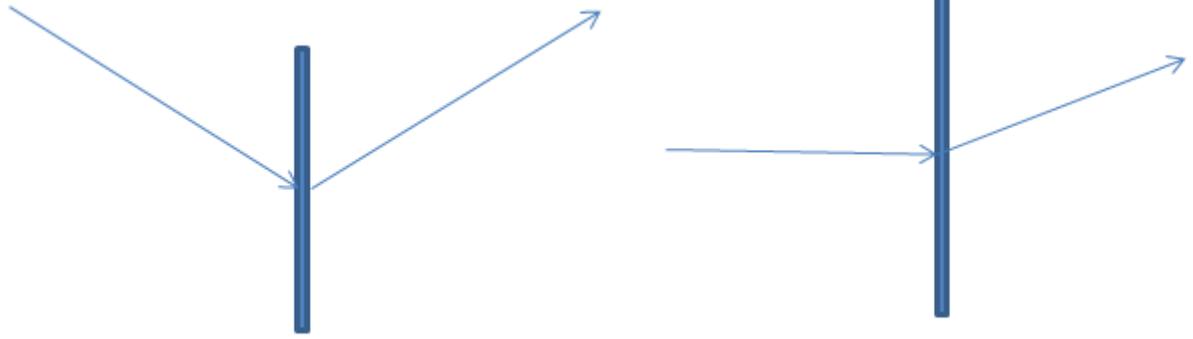
9. 実際に測定できない {002} 極点図から配向関数計算 (Kearns Method)



この値が、TD方向から測定した $\langle 001 \rangle // RD$ のVolume Fraction = 50%の配向関数の値です。

VF%やGauss関数の半価幅を変えることで、配向関数の変化がシュミレーション出来ます。

10. 軸配向なら透過極点図の外周だけで簡易測定が可能 (Fiber Simple Orientation)

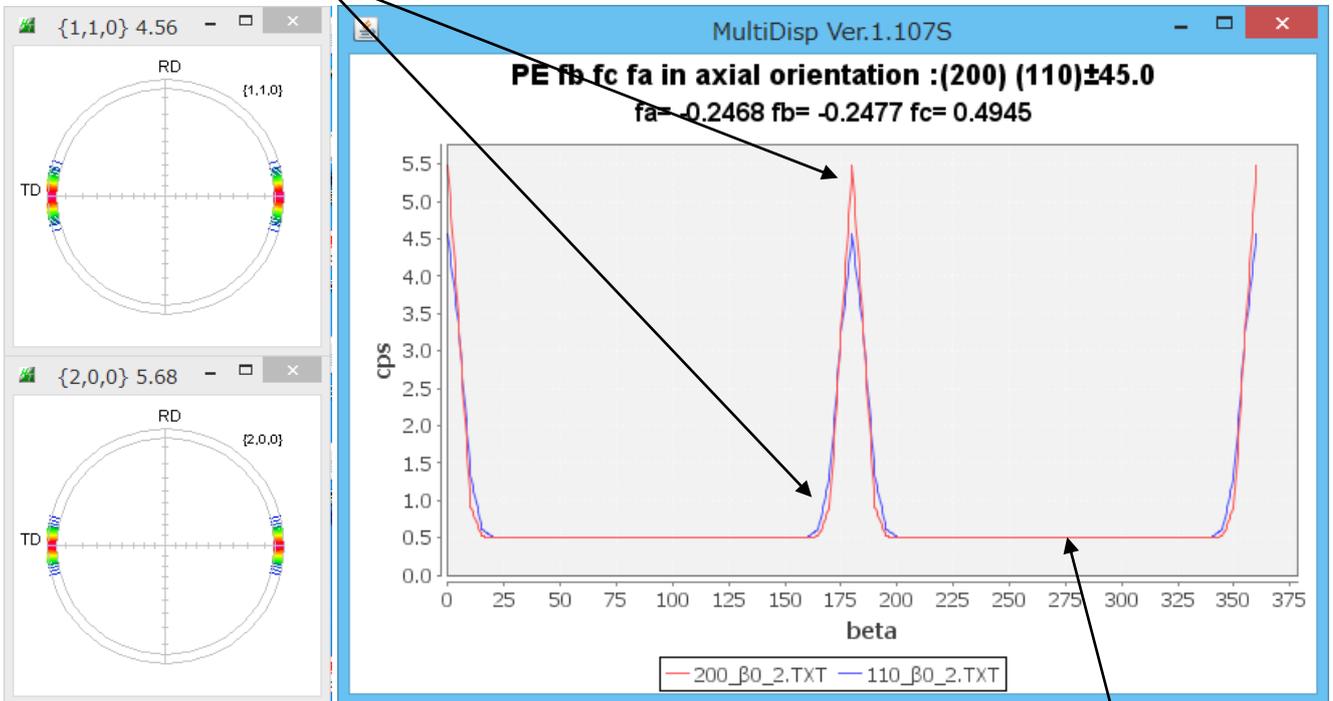


試料を1回転し測定 (短時間で測定)

補正が必要

ファイルサイズが小さい

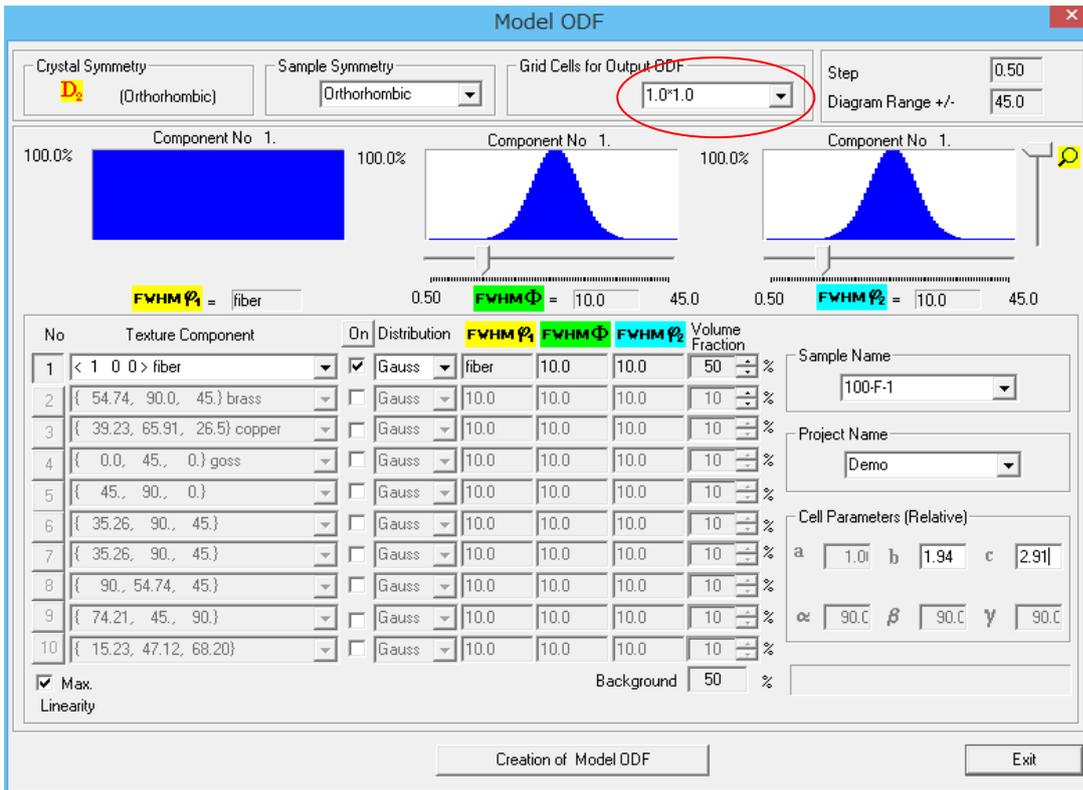
100-F.TPF	2019/10/13 9:00	TPF ファイル	10 KB
110_labotexCW-rp_2.TXT	2019/10/13 9:47	テキスト文書	22 KB
200_labotexCW-rp_2.TXT	2019/10/13 9:47	テキスト文書	22 KB
020_labotexCW-rp_2.TXT	2019/10/13 9:47	テキスト文書	22 KB
100-F-200.TPF	2019/10/13 9:51	TPF ファイル	3 KB
002_labotexCW-rp_2.TXT	2019/10/13 9:52	テキスト文書	22 KB
110_β0_2.TXT	2019/10/13 11:09	テキスト文書	2 KB
200_β0_2.TXT	2019/10/13 11:16	テキスト文書	2 KB



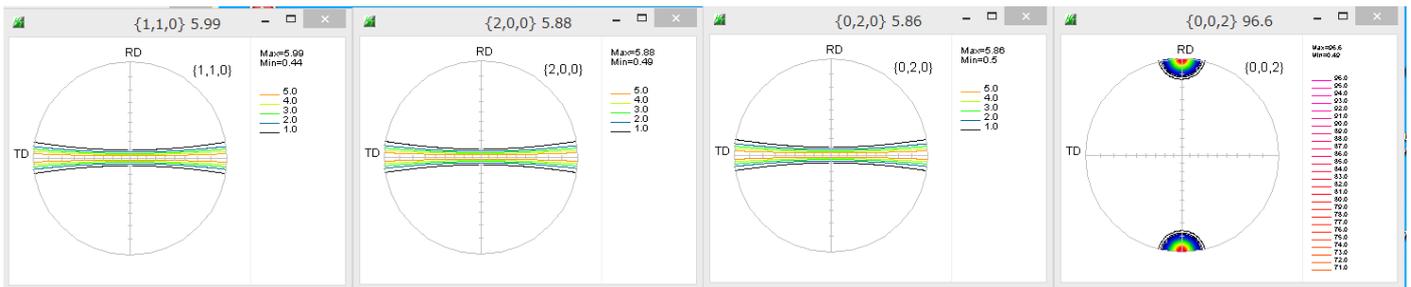
randomレベル

0.4874 → 0.4945として計算されます。

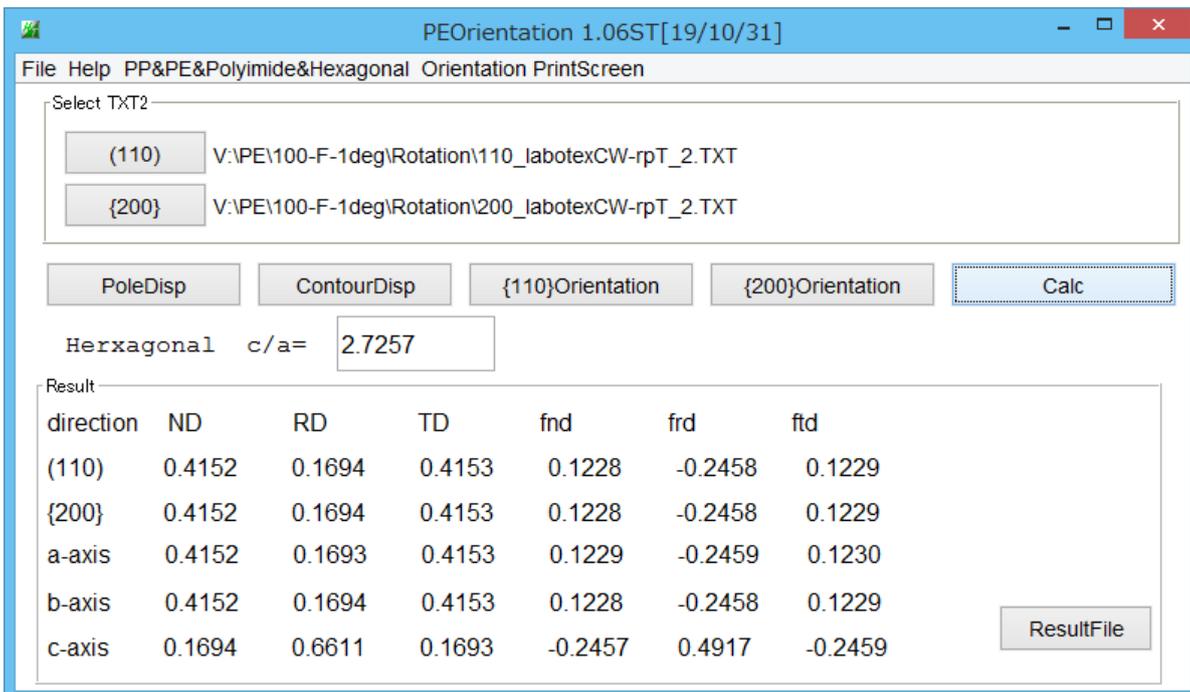
11. データ間隔を5deg→1degで確認



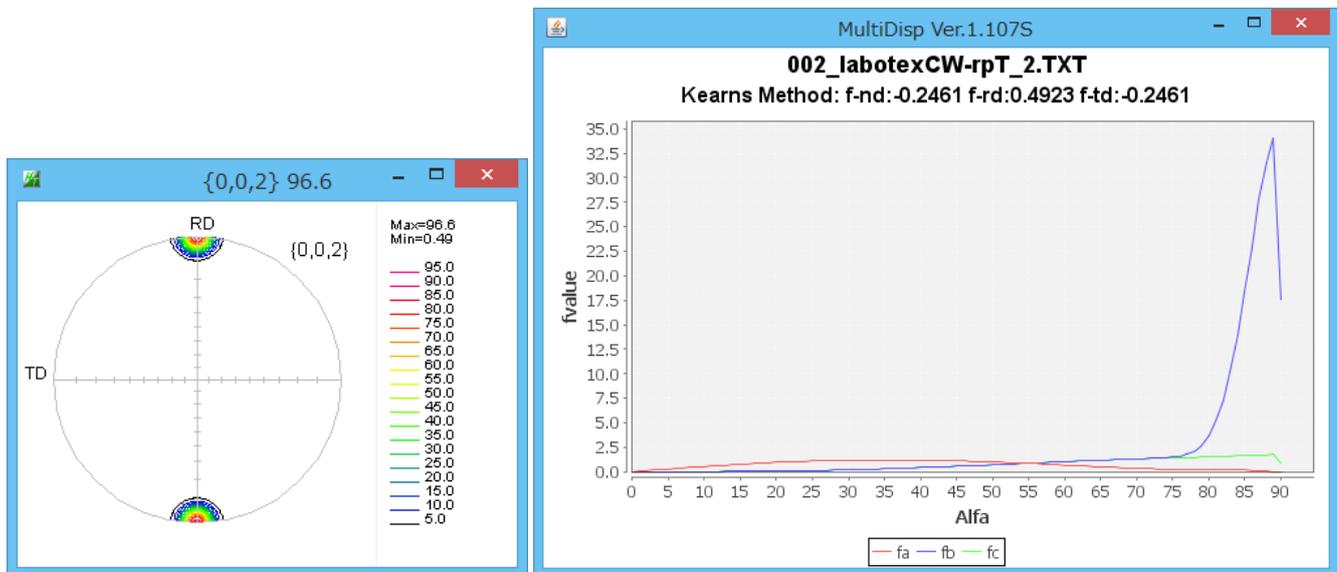
データ回転はPFRotationソフトウェアで行った。



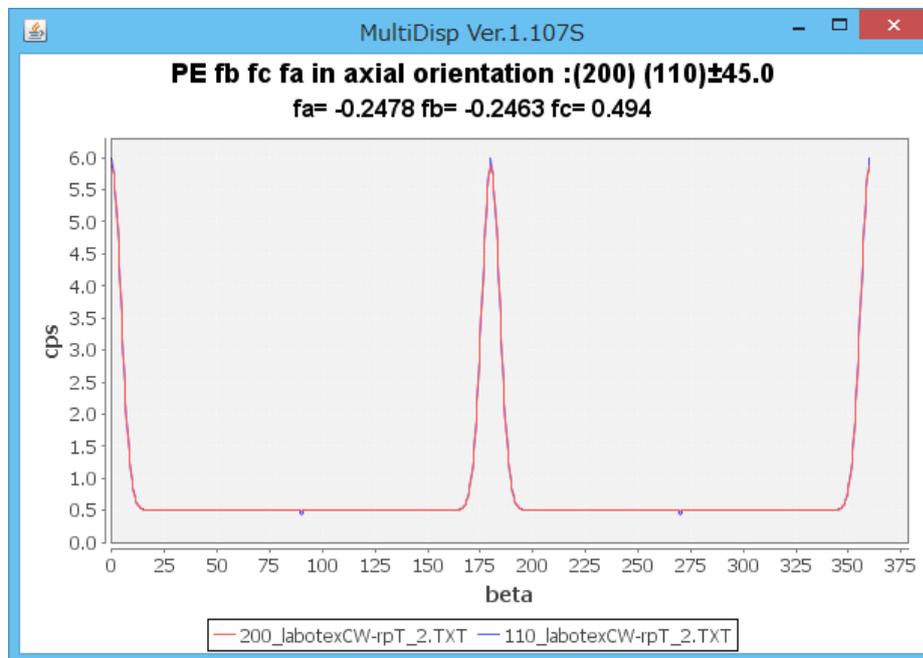
データ間隔を5degから1degにすると最大方位密度が変わります。



Kearns Methodで計算 (Orientation)



軸配向として計算



今までの計算結果は表紙に纏めています。

使用したソフトウェア

LaboTex

極点図を作成

MakePoleFile

LaboTex極点図からTXT2ファイル

PFRotation

面配向から軸配向変更

PEOrientation

極点図からPEの配向計算

Orientation

KearnsMethod

FiberSimpleOrientation

極点図外周から軸配向計算

LaboTex以外はCTRソフトウェアに含まれます。