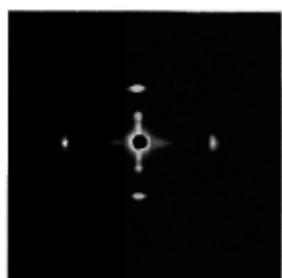


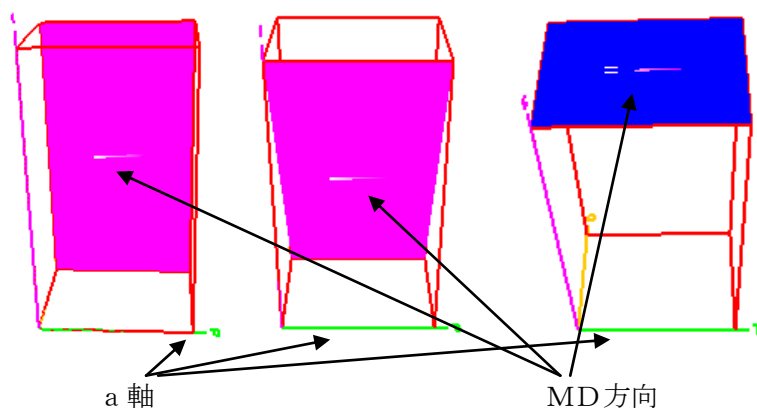
1軸配向 Polyimide の配向評価の考え方

高分子論文集「完全棒状ポリミドの一軸配向高度化」のXRDに以下のXRD写真がありました。



Polyimideなら、(002)、(110)、(200)、(020)と並んでいると思われます。

この写真から可能性の高い極点図をシュミレーションし、配向関数と配向分布関を計算比較してみます。
a軸がMD軸と平行である事になります。



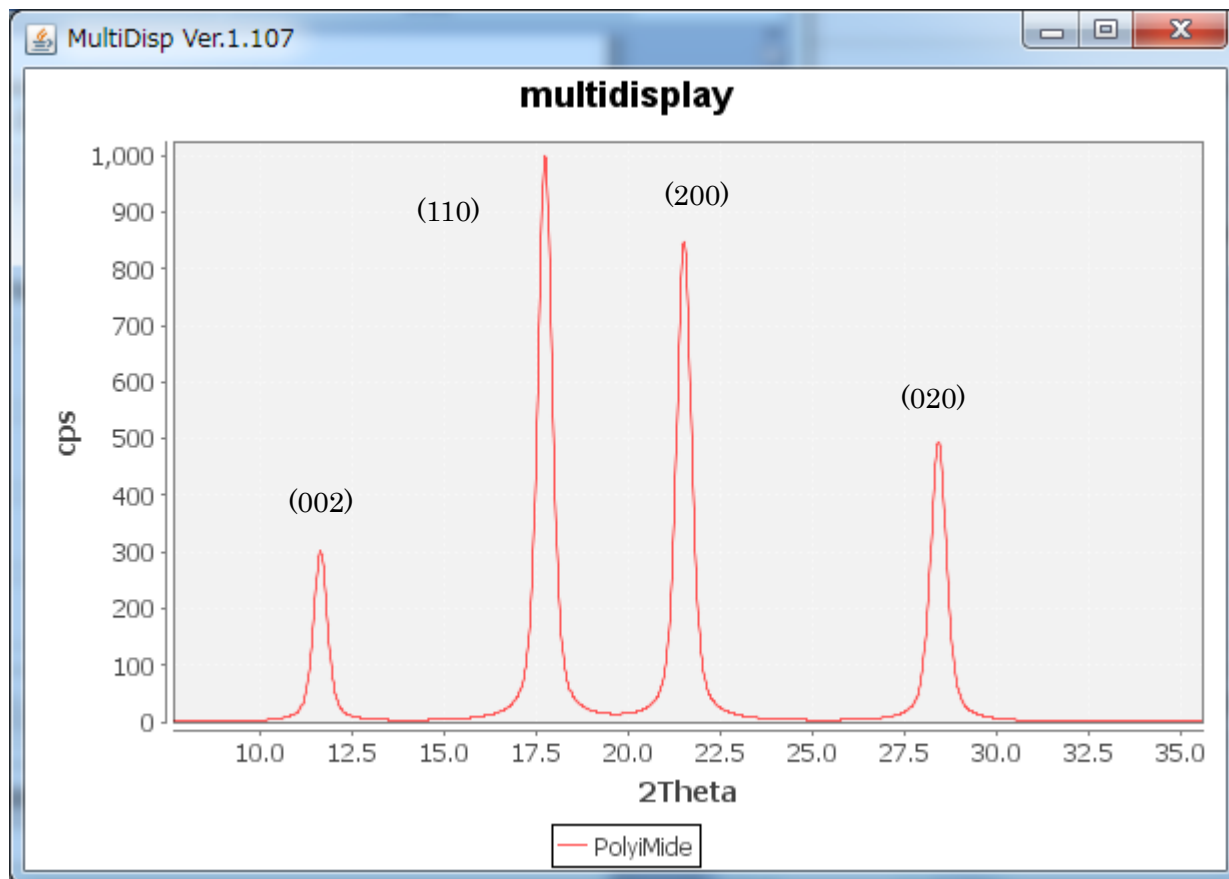
このような事がCTRソフトウェア+ODF解析で簡単に理解でき、
結晶方位の定量可能になります。

2016年03月09日

HelperTex Office

概要

Polyimideの回折プロファイルは以下で



ICDD 表現

```
PolyimideDISP
Orthorhombic
8.26 (1.0)
6.28 (0.7603)
15.2 (1.8402)
90.0
90.0
90.0
1.54056
4
0 0 2 30.0 7.6 11.634
1 1 0 100.0 4.9992 17.727
2 0 0 85.0 4.13 21.498
0 2 0 50.0 3.14 28.401
```

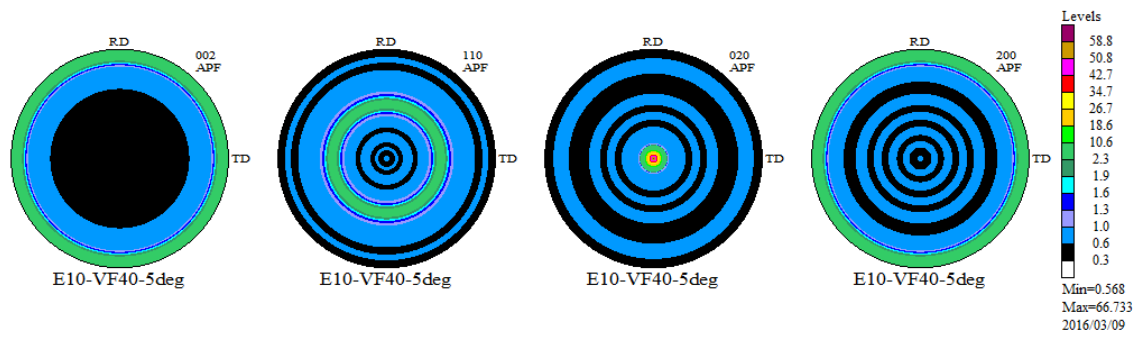
LaboTex 表現

```
PolyimideDISP
Orthorhombic
6.28 (1.0)
8.26 (1.3153)
15.2 (2.4204)
90.0
90.0
90.0
1.54056
4
0 0 2 30.0 7.6 11.634
1 1 0 100.0 4.9992 17.727
2 2 0 85.0 4.13 21.498
2 0 0 50.0 3.14 28.401
```

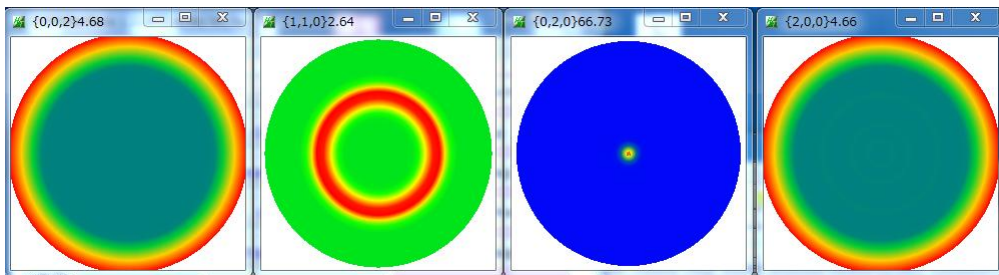
Orthorhombicの場合、LaboTexとICDDでは表現方法が異なります。

- LaboTex で{020}-fiber を作成し、{002},{110},{020}極点図をExportし
- 極点図をTD軸に対し90度回転して、ICDD 指数に変更し、1軸配向極点図{002},{110},{200}極点図を作成
- {200}極点図から配向関数
- {110},{200}極点図の外周βプロファイルから配向分布関数を計算し
- 配向関数のfrdと配向分布関数のfcを比較する。

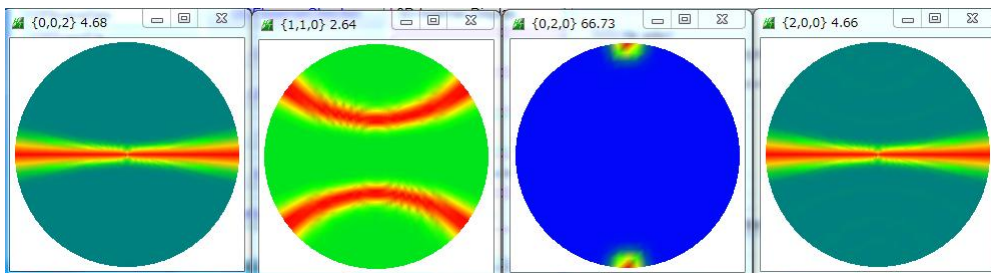
LaboTexによる $\{020\}$ - Fiber 極点図(FWHM=10deg、VolumeFraction=40%)



Exportした極点図

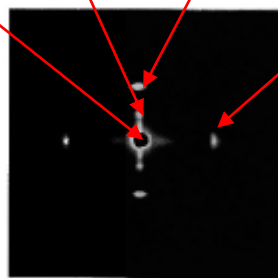
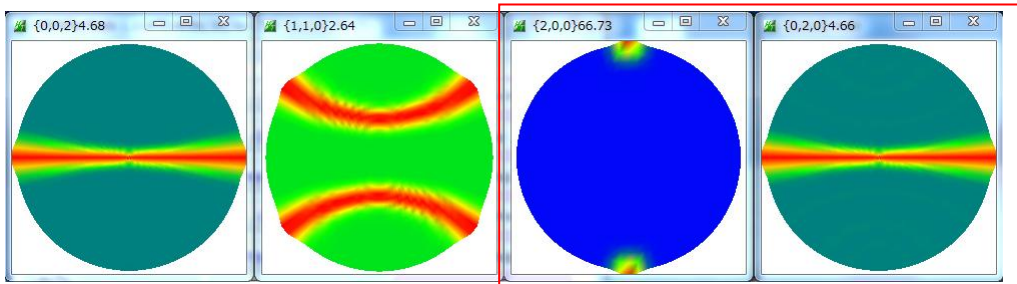


TD軸90度回転



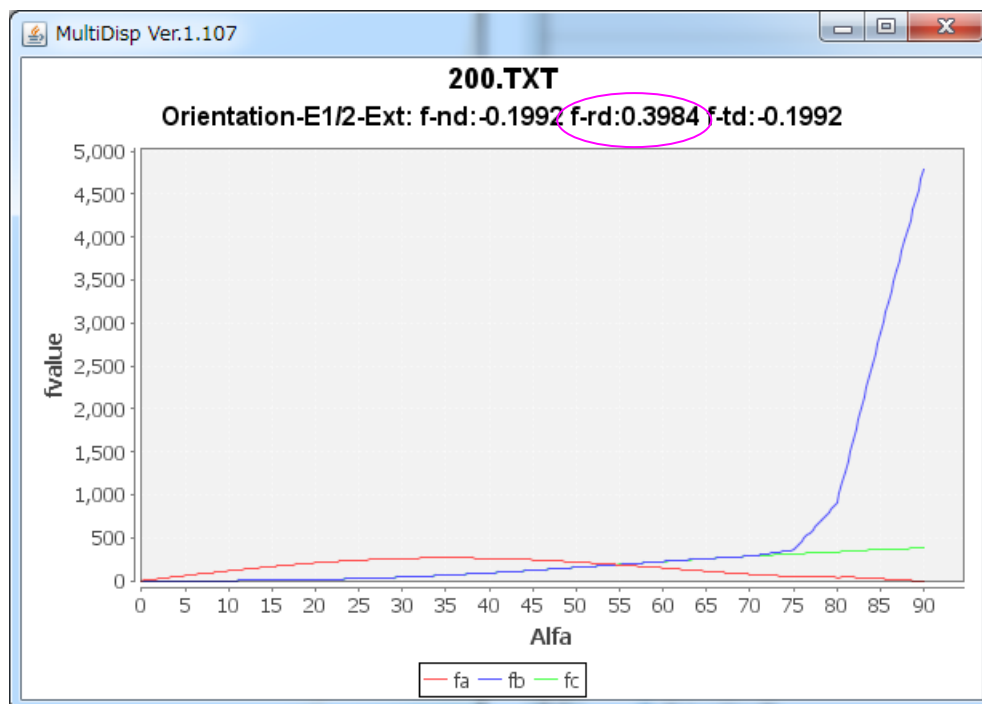
極点図指数をLaboTexからICDDに変更

$\{200\}$ と $\{020\}$ のhk指数を逆転させる

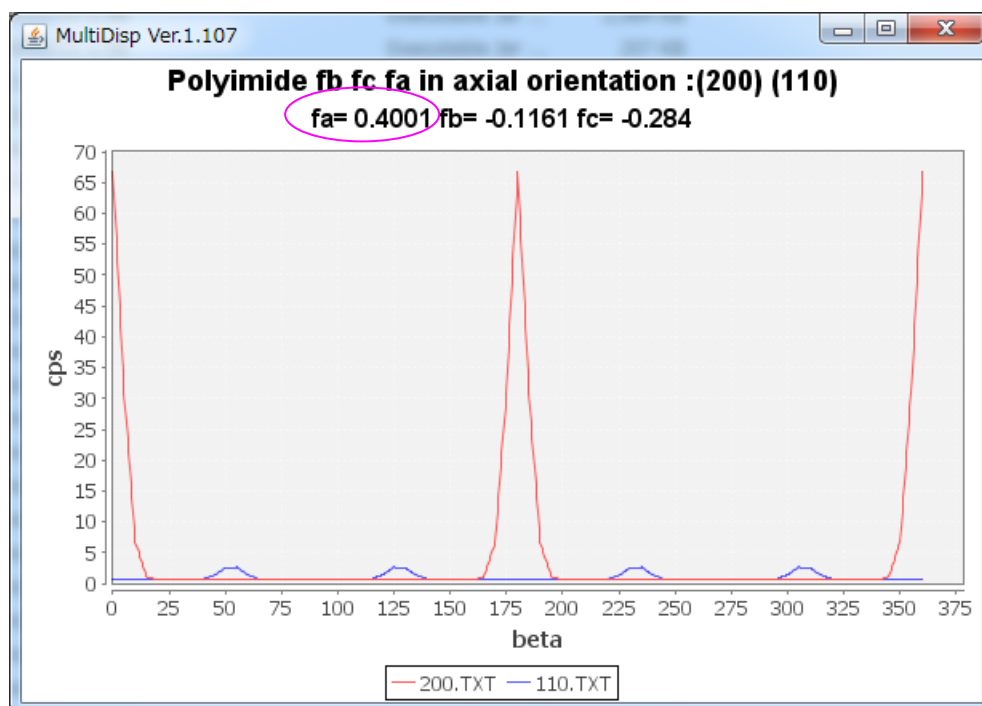


極点図が、「完全棒状ポリミドの一軸配向高度化」と一致しています。

{200} 極点図から配向関数の計算



{200}、{110} から配向分布関数の計算



この結果より、a軸がMD軸と平行である事になります。

{200} 完全極点図でなく、極点図の外周のみで平行度合い評価が可能になります。