

1軸配向Polyethyleneの極点図解析

2019年09月16日

HelperTex Office

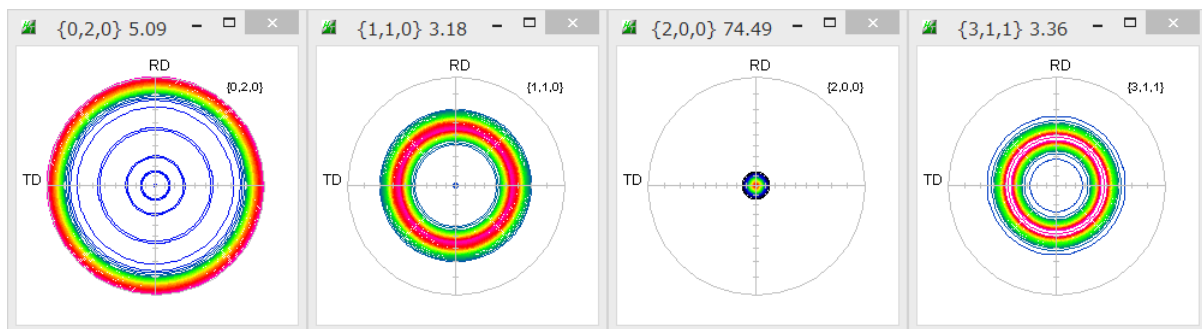
概要

面配向材料をTD方向から測定すると、軸配向になるが、面配向に比べ、軸配向の解析は難しい。理由として、極点図の場合、 α 方向の補正として、吸収、defocus、バックグラウンドの畳み込みがありこの分離が難しい。

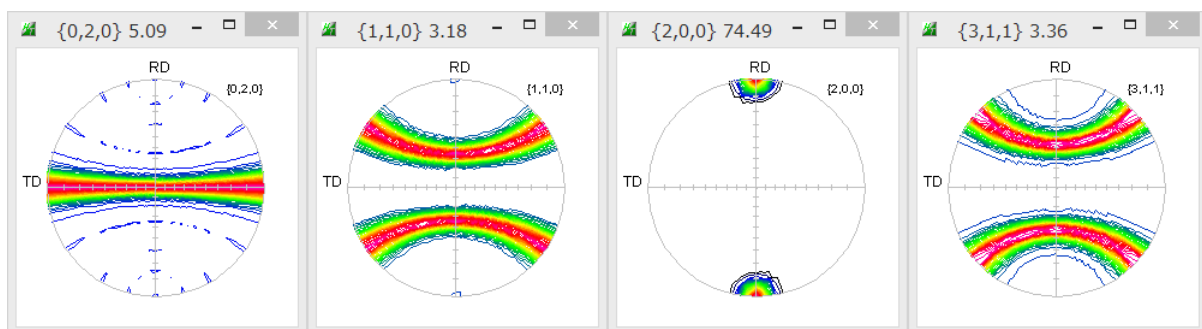
本資料では、Polythlene を例にシュミレーション後に実際の測定データに応用してみます。

シュミレーションに使う極点図

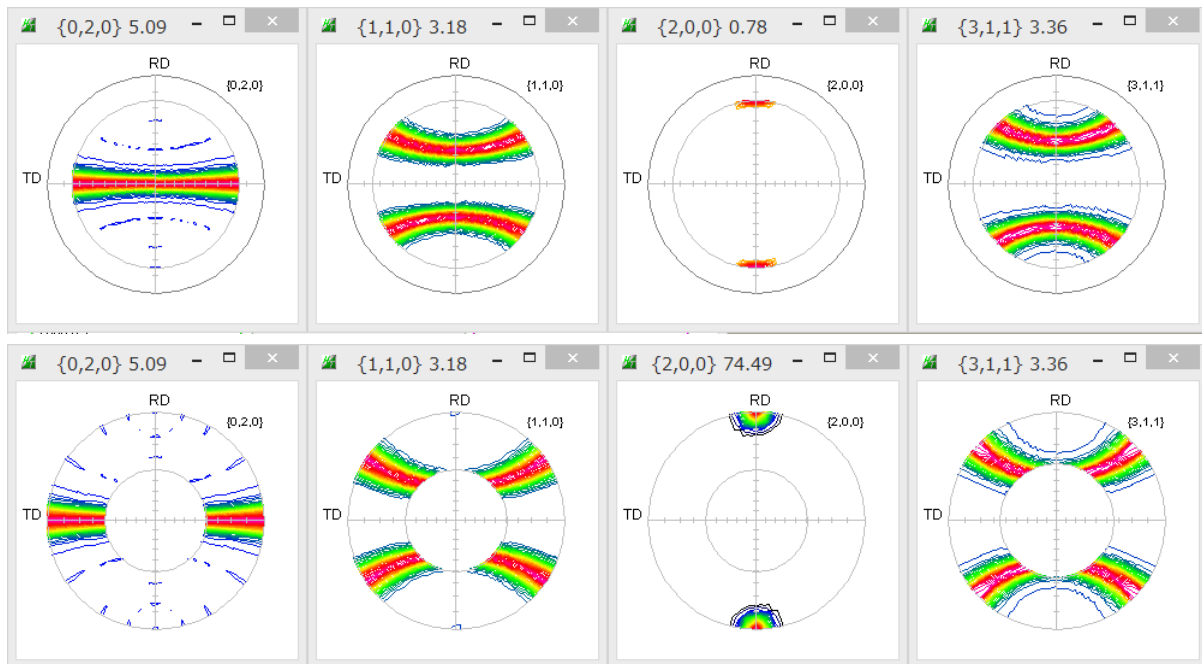
面配向データ



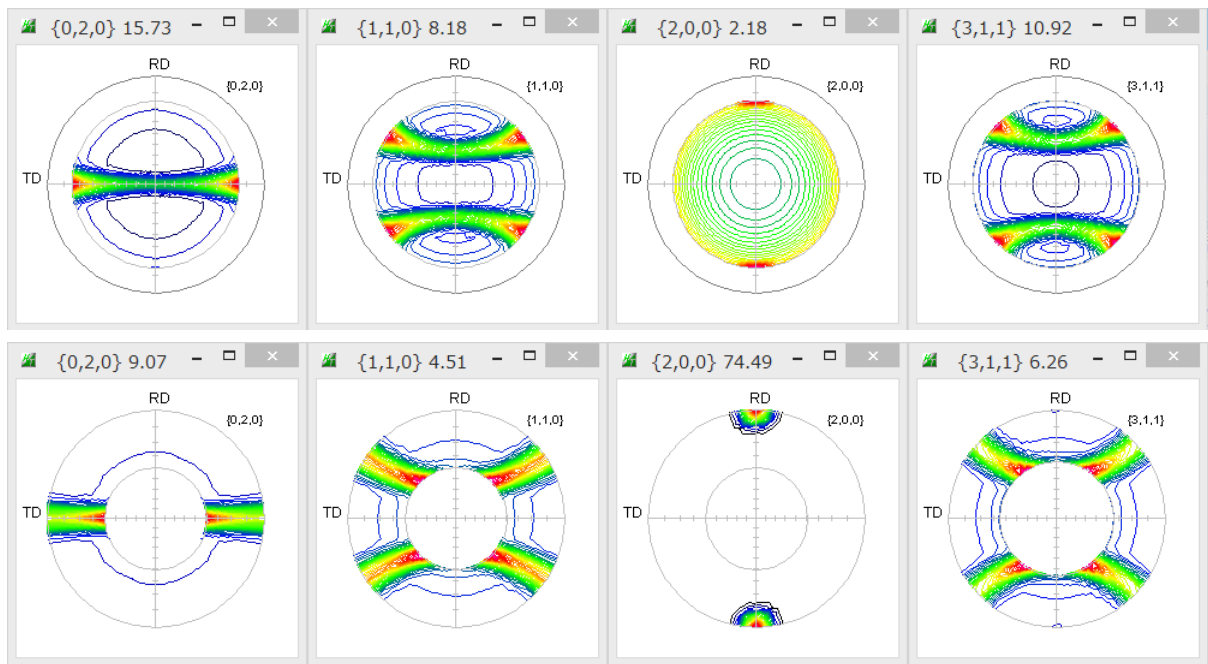
軸配向データ



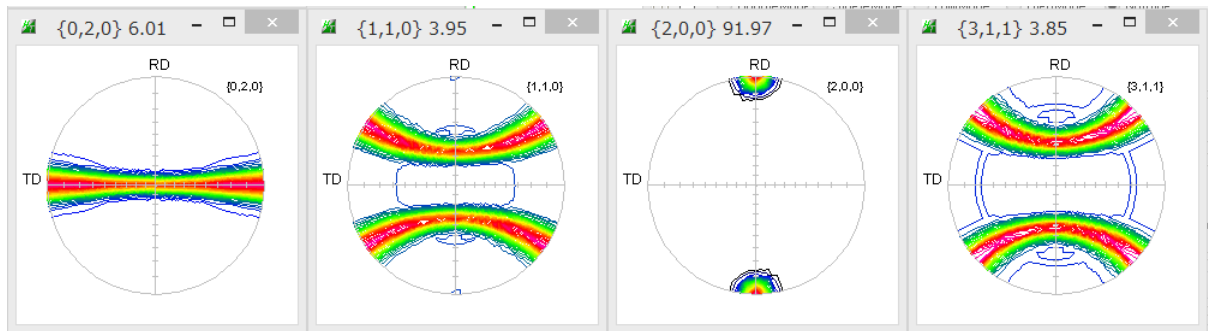
反射、透過分離



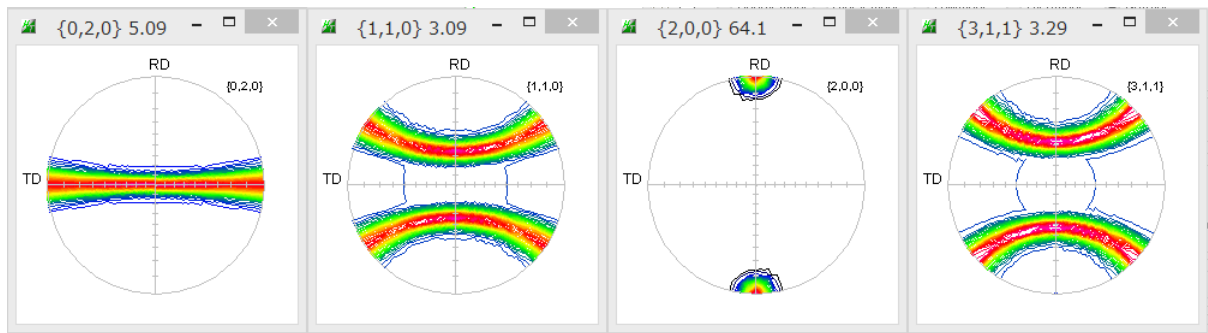
吸収効果により測定される極点図



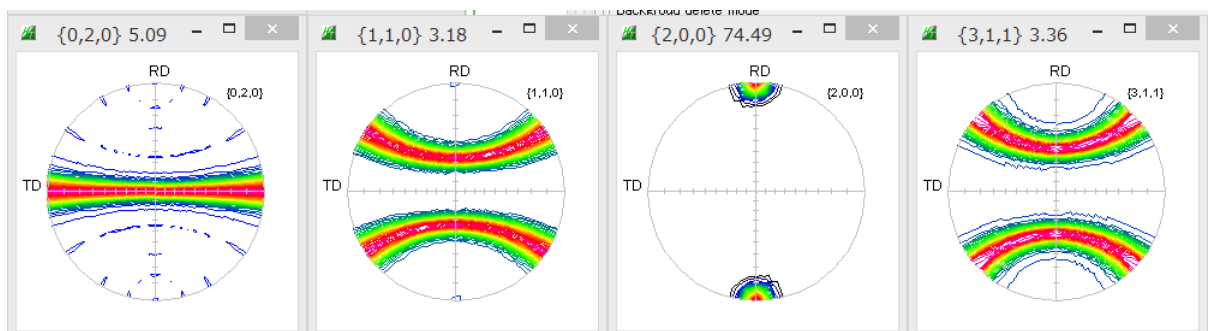
補正時、実際の試料より試料の厚さが厚い場合($t=0.008\text{cm}$)



補正時、実際の試料より試料の厚さが薄い場合($t=0.0001\text{cm}$)

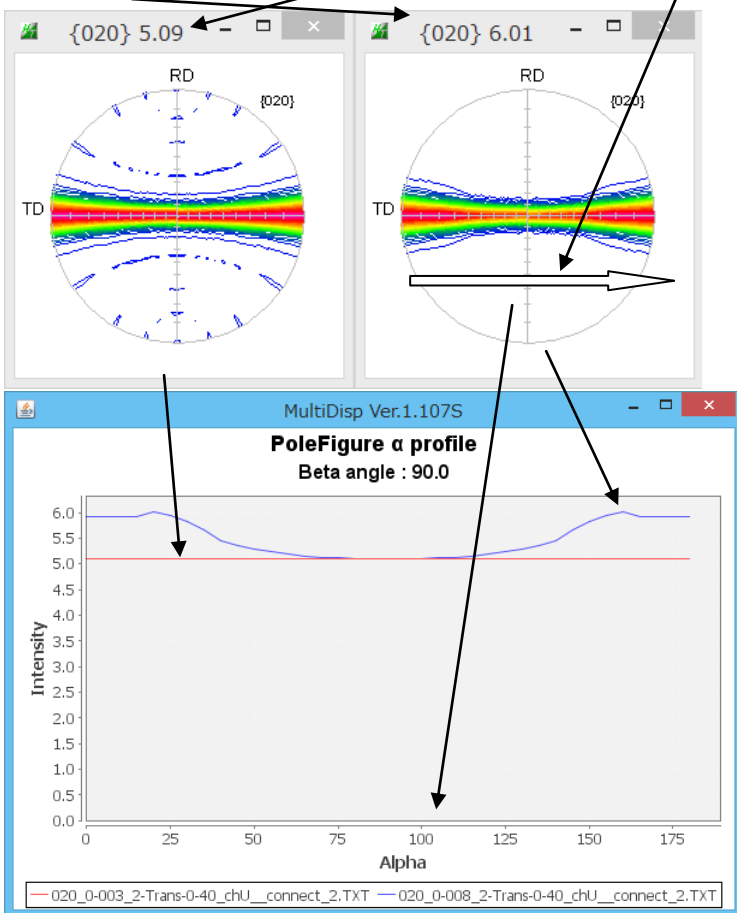


補正時、実際の試料より試料の厚さが同一の場合($t=0.003\text{cm}$)

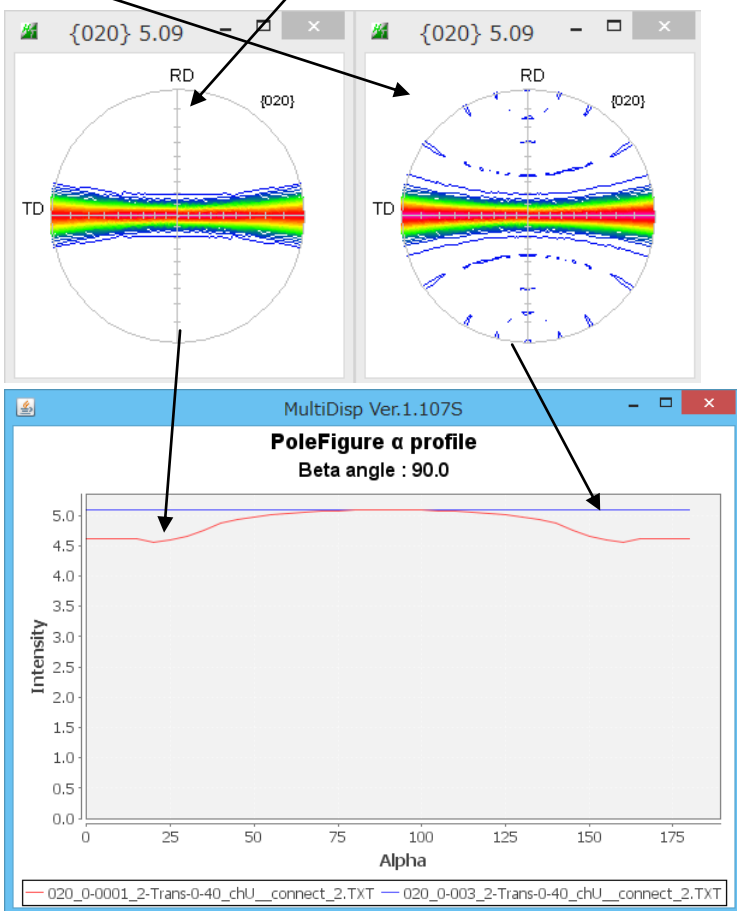


{0 2 0} 極点図プロフィール比較 (β 90 \rightarrow 180 プロファイル)

t = 0.008cm VS t = 0.003cm

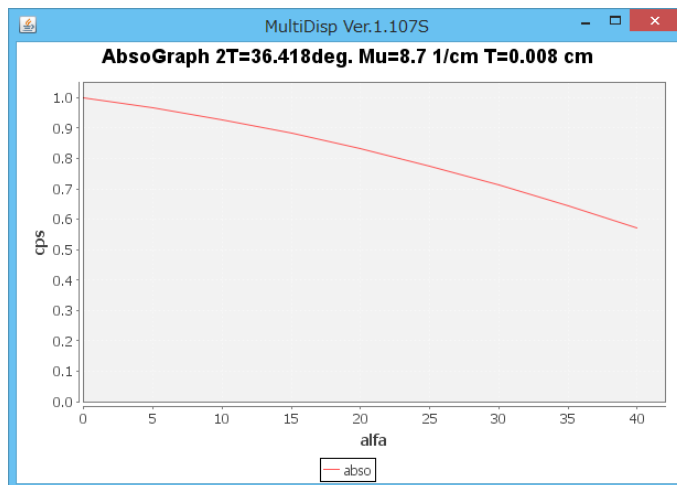
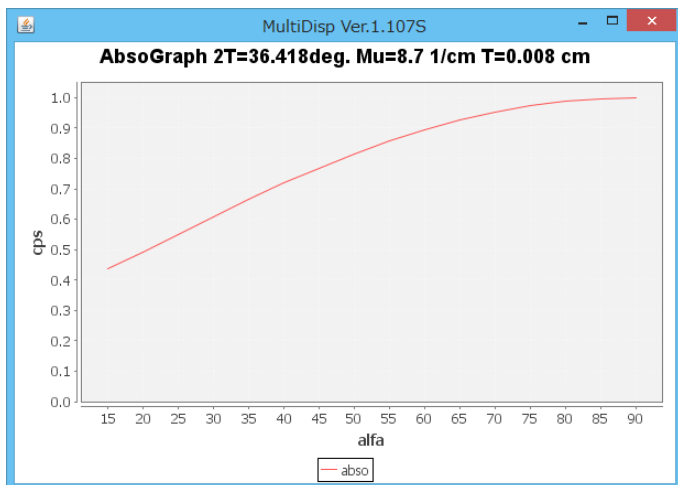


t = 0.003cm VS t = 0.0001cm

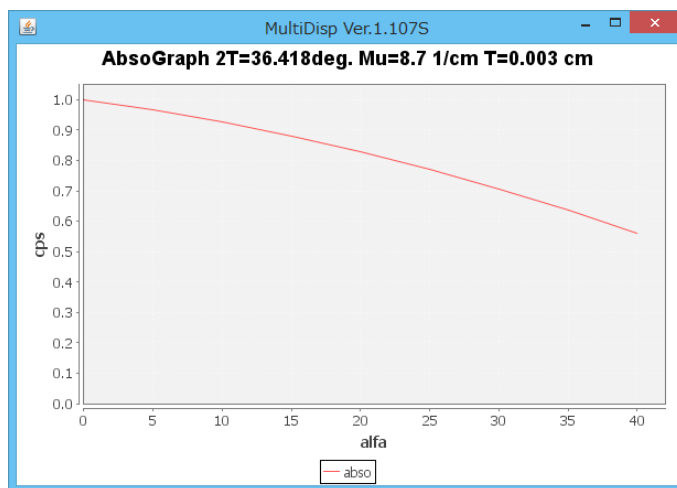
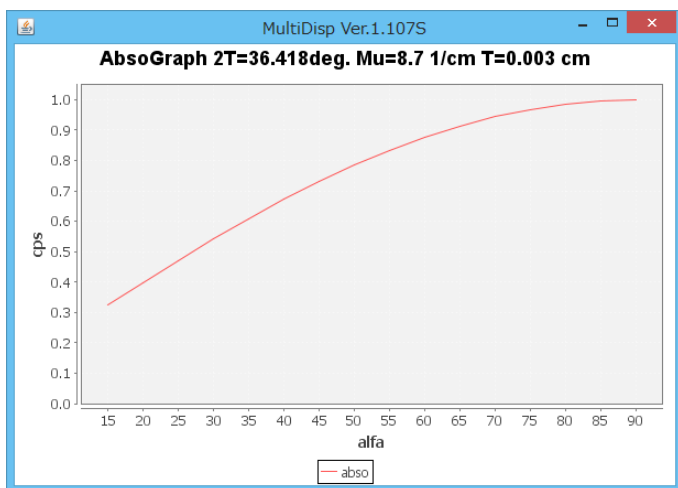


吸収補正量比較

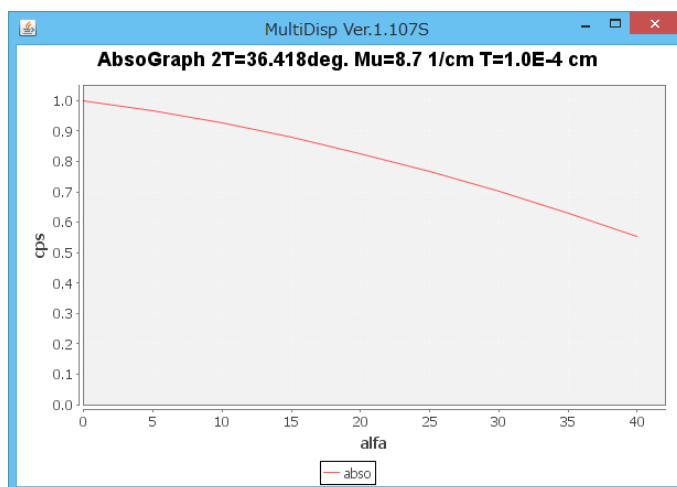
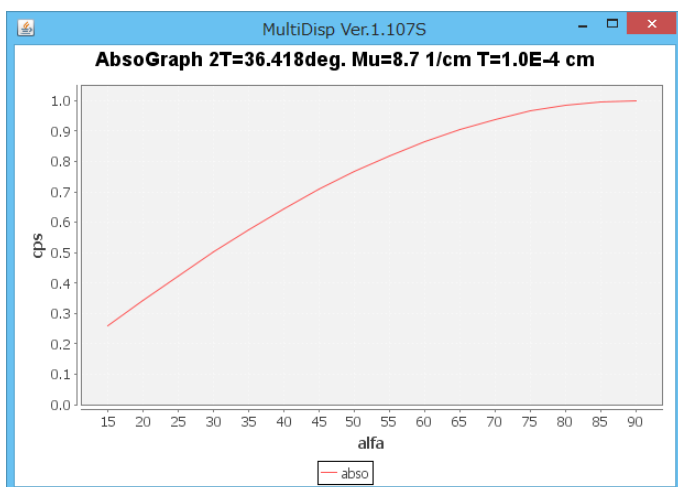
$t=0.008\text{cm}$



$t=0.003\text{cm}$

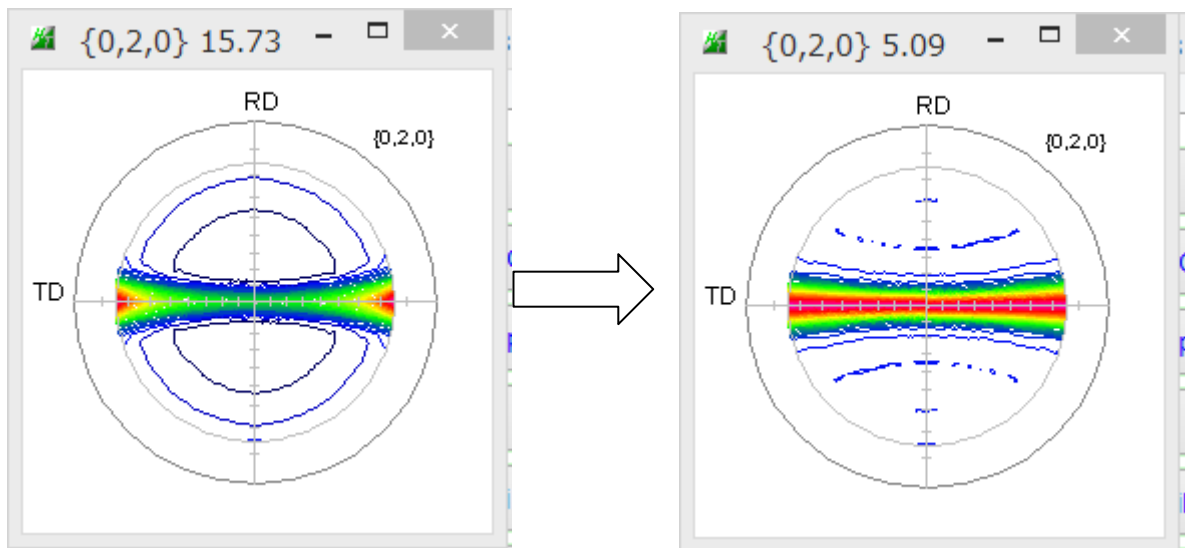


$t = 0.0001\text{cm}$



このように試料の厚さにより補正量が大きく変わります。
正確な値を入力してください。

軸配向材料の厚さを計算する。

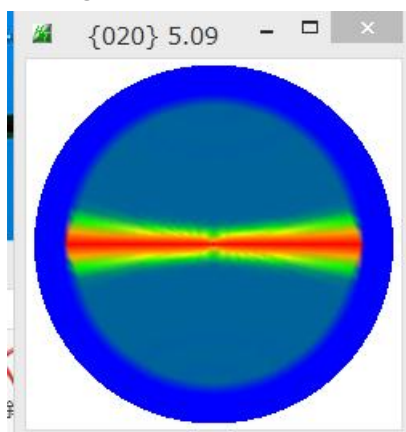


上記補正の試料の厚さを計算する。

Search thickness で厚さを計算

Absorption coefficient 8.69 1/cm Thickness 0.003 cm

AbsCalcPoleFigure で補正ファイルが作成される。



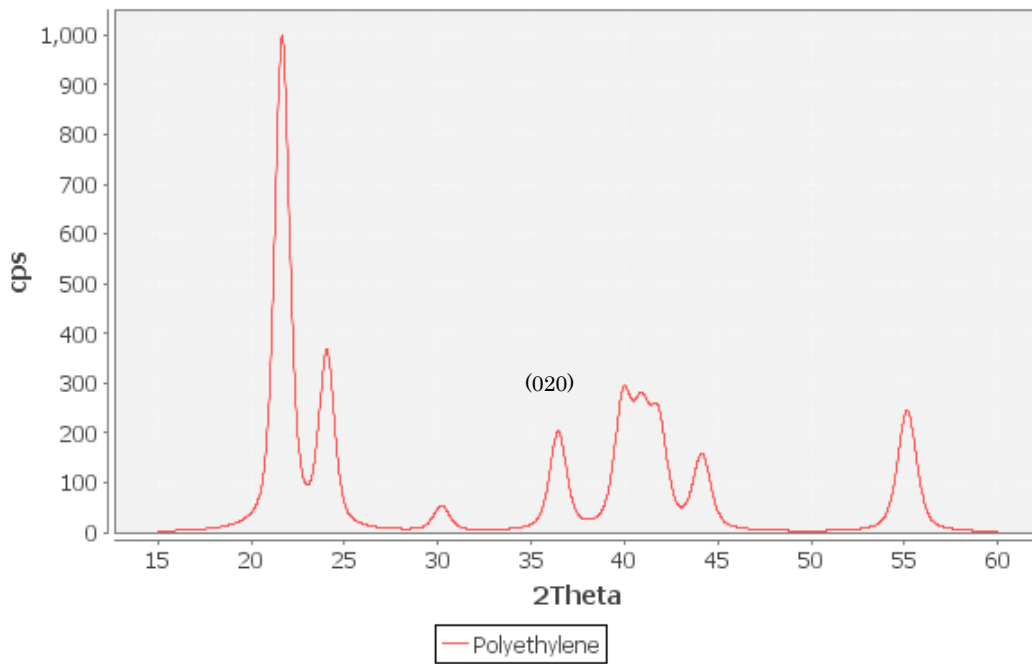
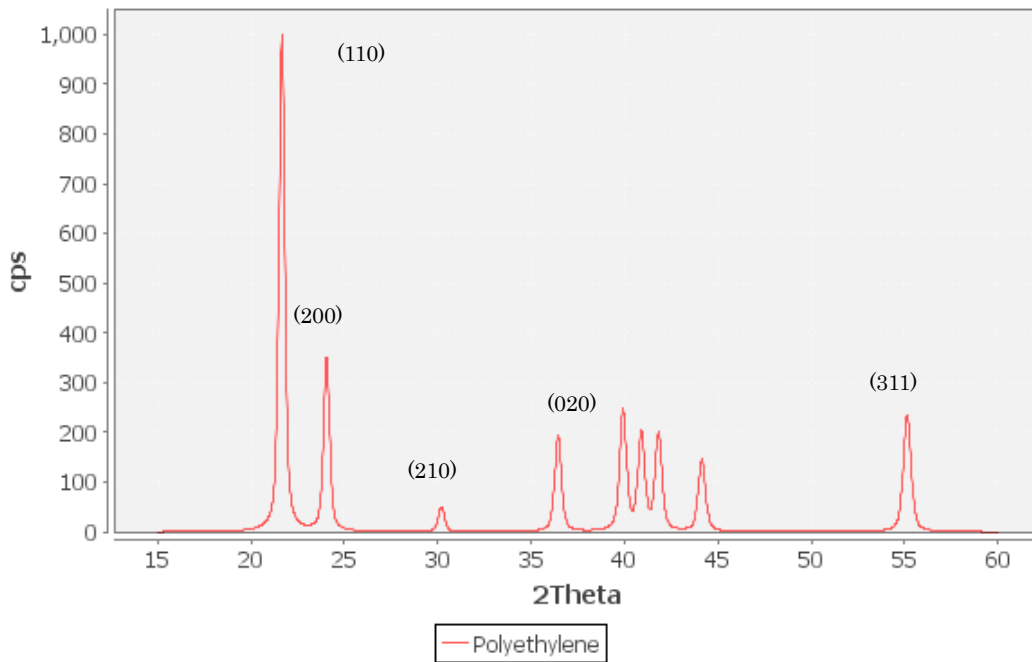
defocus

高分子材料の場合、吸収と defocus が畳み込まれていると考えた場合

試料と同一材料による無配向試料による極点測定を用いた補正が考えられるが、この方法は難しい。

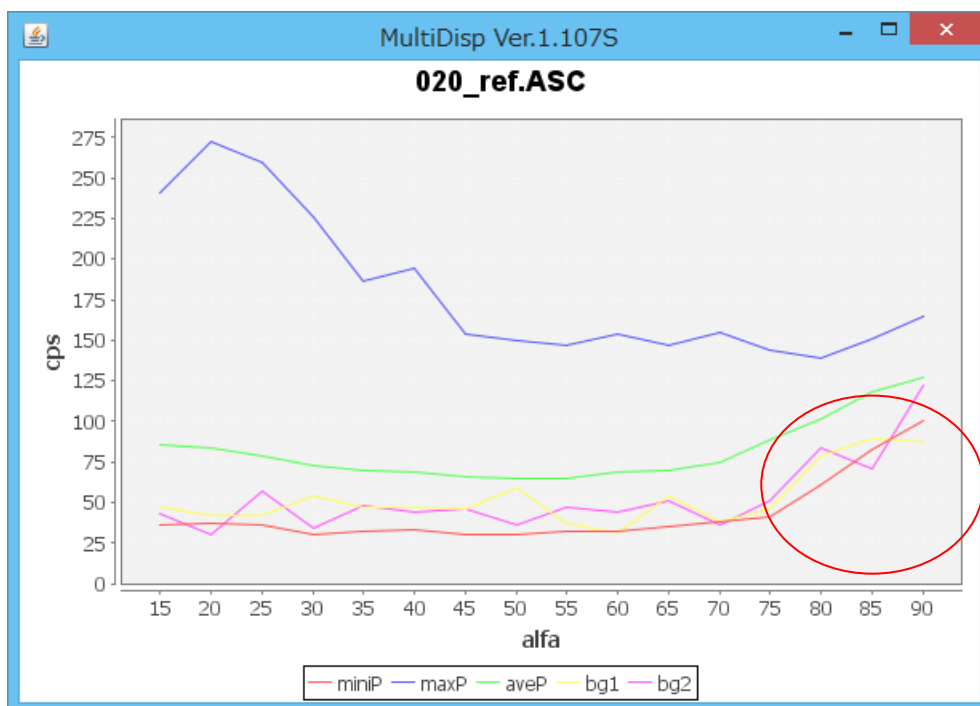
バックグラウンド

PE の場合



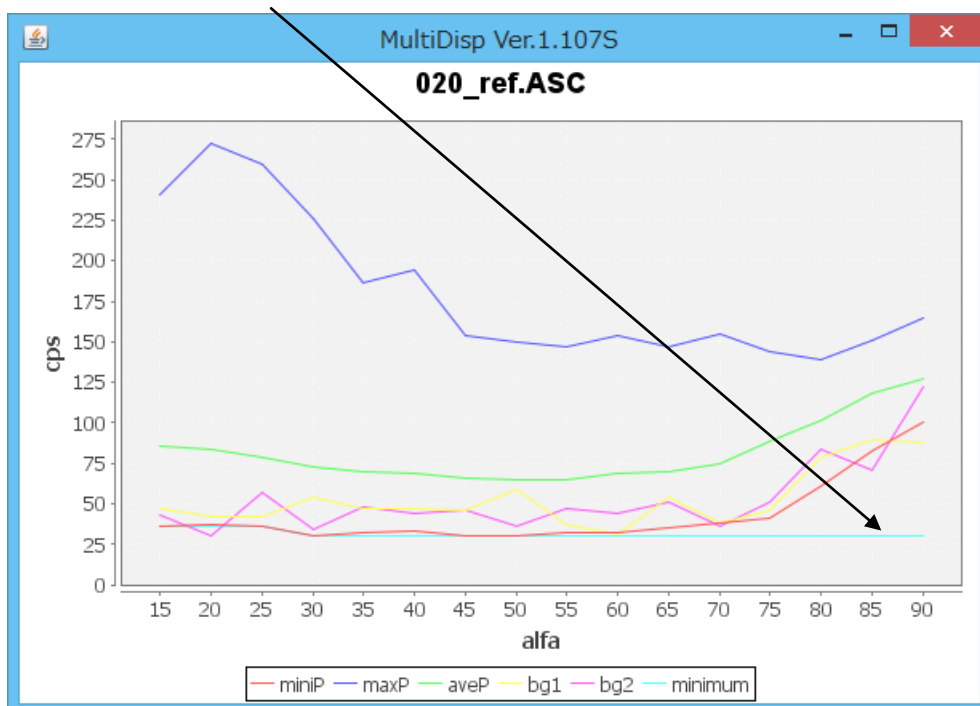
回折線の影響の少ない2θ角度でバックグラウンドの測定を行うが、測定時試料を煽って測定するため、回折線が広がりバックグラウンドに影響がでます。

又、極点図の中心バックグラウンドが大きくなる事があります。



このような場合、修正しましょう。

修正したバックグラウンド(ODFPoleFigure2 の機能)



実測データの場合

T X T 2 データを作成

The screenshot shows the PoleOrientationTools 1.13ST[19/10/31] by CTR interface. On the left is a circular pole figure plot with a color scale from blue to red. The main window contains several panels:

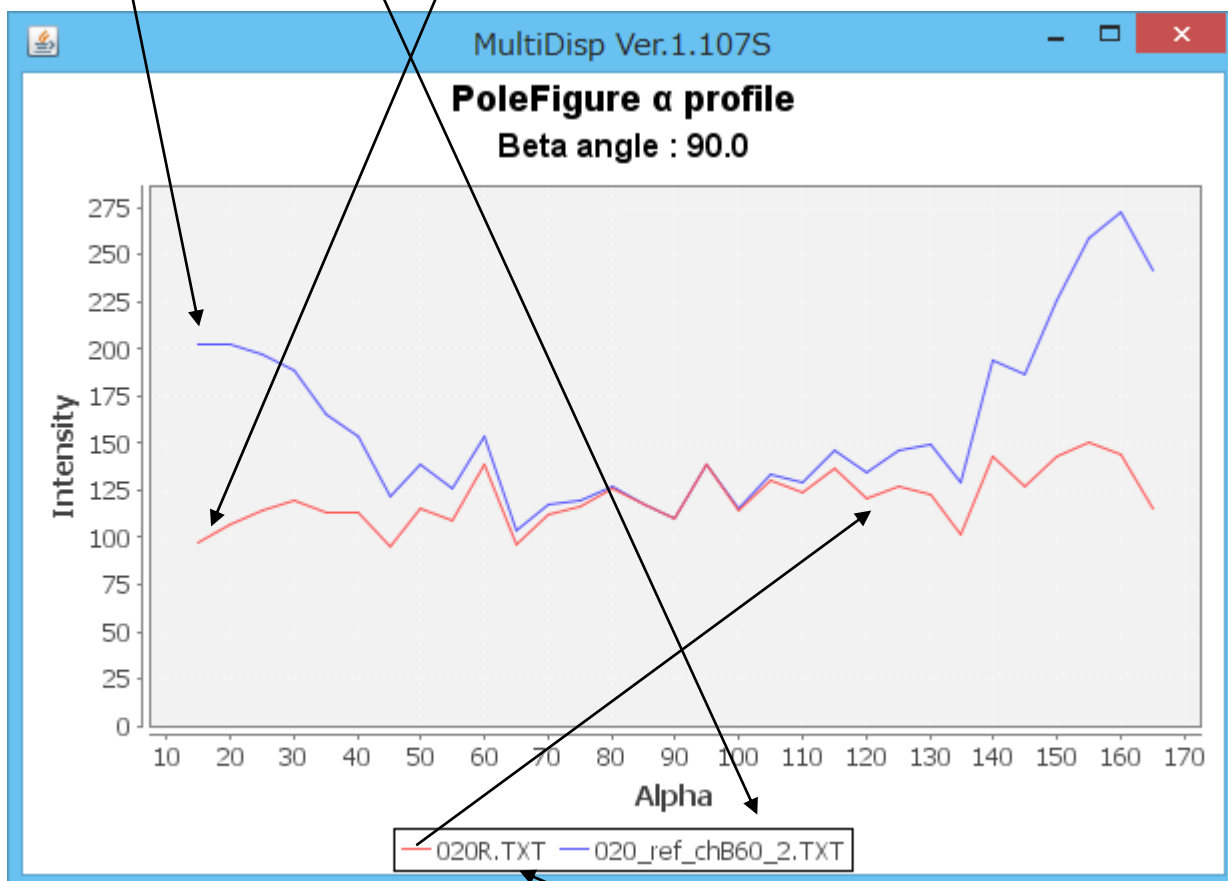
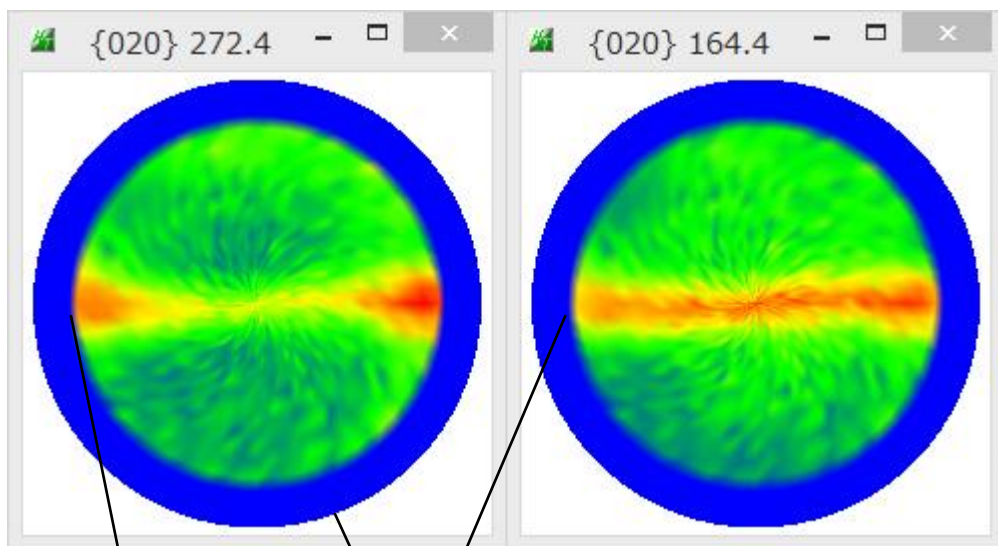
- File Help**: A list of operations with corresponding buttons:
 - TPF,HPF,TXT,TXT2 Full Polefigure TXT → Orientation → fnd,frd,ftd Display
 - TXT2 Reflection(001) PoleFigure → NDOrientation → fnd Display
 - TXT2 Reflection PoleFigure → CreateExpPoleFigure → fnd,frd,ftd Display
 - TXT2 PoleFigure → RandomLevelCalc → Cr Display
 - TXT2 Trans.Reflection polefigureTXT2 → PFConnection → Complete polefigure
- Files select**: ASC(RINT-PC) and 020_ref.ASC.
- Calcratation Condition**: Includes background delete mode (DoubleMode, SingleMode, LowMode, HighMode, Nothing), BG defocus (DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm), Trans blinds angle (30.0), Peak slit (10.0 mm), BG Slit (10.0 mm), PeakSlit / BGS (80.0 deg, 90.0 deg), AbsCalc (Ref, Trans), Schulz reflection method, Absorption coefficient (0.01 1/cm), Thickness (0.1 cm), 2Theta (36.0 deg), and 1/Kt.
- Defocus file Select Transmission defocus HKL+T**: Options for Defocus(1) functions file, Defocus(3) function files folder (BB185mm), and Defocus(2) function files folder (LINE-BB-185mm).
- Smoothing for ADC**: Cycles (5), Weight (8), Disp.
- Normalization**: CTR, Connect, Average, Asc, MTexAsc, Ras, TXT, TXT2.
- Buttons**: Cancel, Calc, Connect, Exit&ODF, ODF, ValueODFVF..., ValueODFVF-A.
- Bottom status**: Select crystal : Orthorhombic 19/09/16.

試料の厚さを計算 (バックグラウンド削除なしでもよい)

The screenshot shows the AbsCoefSearch 1.00ST[19/10/31] by CTR interface. On the left is a circular pole figure plot. The main window contains several panels:

- Material**: Material Polyethylene.TXT.
- Select TXT2**: TXT2 C:\VCTR\DATA\PE\020_ref_chB60_2.TXT.
- AbsCalc**: Schulz reflection method, Absorption coefficient (8.69 1/cm), Thickness (0.0098 cm), 2Theta (36.42 deg), 1/Kt. The thickness value 0.0098 is circled in red.
- Buttons**: TD, RD, Search thickness, AbscalcPoleFigure.

比較



計算された厚さ0.0098で軸配向らしい極点図になります。