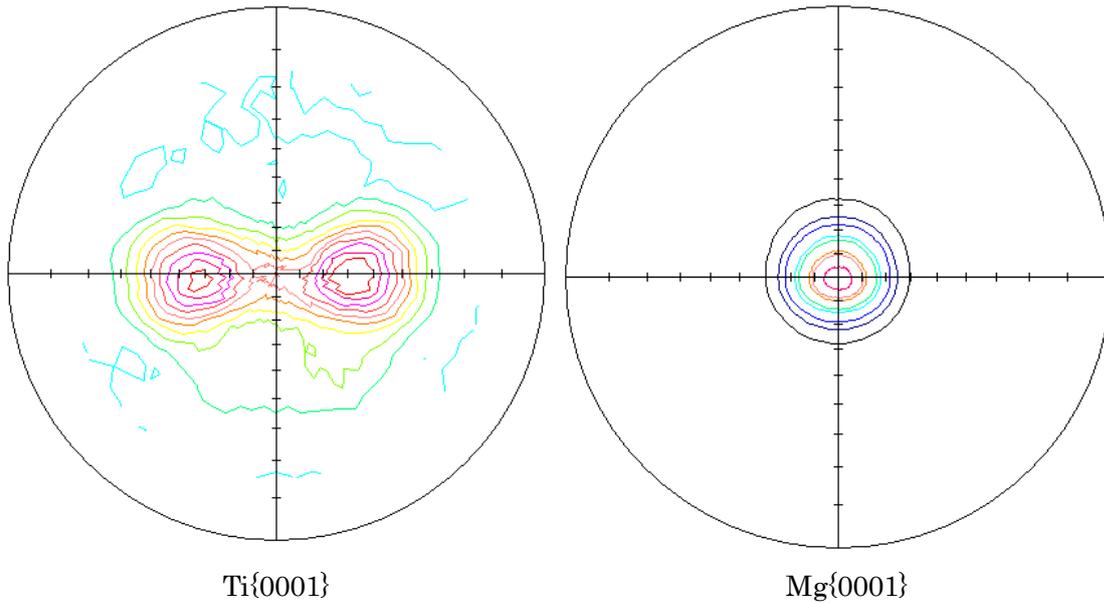


# 反射極点図から配向度関数評価

底面配向が強い材料に適用、透過極点領域は指数関数で外挿し、完全極点図化



2011年06月26日

## 概要

高分子、バルク、繊維などの配向状態評価として従来から X 線回折装置が利用されている。評価方法として、試料面法線を回転軸にしてプロファイル測定を行い、その半価幅で評価したり透過、反射極点測定から完全極点図を作成し、配向度関数評価を行っていた。

本、説明は、反射極点図から試料の配向状態を数値化する方法を紹介する。

## 極点処理

測定された極点図に対し、バックグラウンド処理、平滑化、RD補正、吸収補正、defocus補、強度の規格化を行う。

## 配向度関数

立方晶以外に適用出来る万能の関数であり、材料のND、RD、TD方向に対する配向の度合いが数値化される。対象は完全極点図である。

極点図の中心を0.0度、極点図の外側を90.0とした場合

$$f_{nd} = n_d / T$$

$$f_{rd} = r_d / T$$

$$f_{td} = t_d / T$$

$$\text{ただし } T = \sum \sum I_c(\alpha, \beta) * \sin(\alpha)$$

$$n_d = \sum \sum I_c(\alpha, \beta) * \cos^2(\alpha) * \sin(\alpha)$$

$$r_d = \sum \sum I_c(\alpha, \beta) * \sin^3(\alpha) * \cos^2(\beta)$$

$$t_d = \sum \sum I_c(\alpha, \beta) * \sin^3(\alpha) * \sin^2(\beta)$$

## 底面配向の評価

底面配向した材料の極点図は、{001}極点図の中心付近に極が集中し、中心に以外に極が存在しない。

{001}の極点図を出来るだけ広く測定し、正確な強度補正を行う。

測定出来ない極点図の外周には極が存在しないので、測定されていない領域を指数関数で外挿し完全極点図とし、更に強度の規格化を行い、上記配向度関数を適用する。

## 2つ目極点図処理

完全極点図化を行い、配向度関数を評価 (ND, RD, TD)

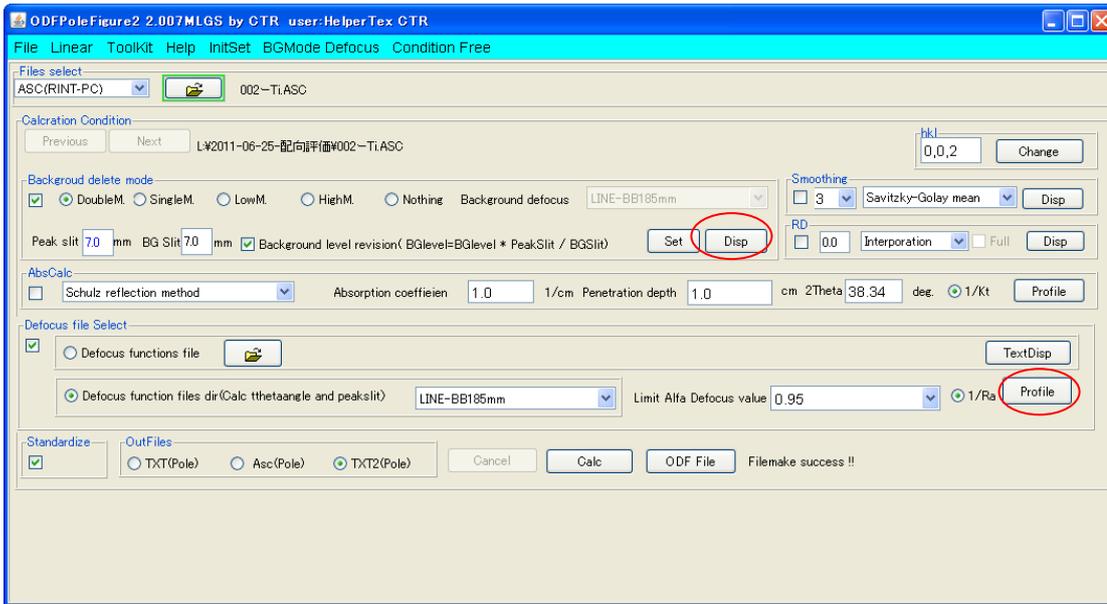
## 1つ目極点図処理

$\beta$ 方向の平均値を算出し、配向度関数を評価 (ND)

## 磁性特性と配向

高木氏などの論文計算式を実現

## 2つ目極点図、ODFPoleFigure2 ソフトウェアによる精密な極点処理



入力データ

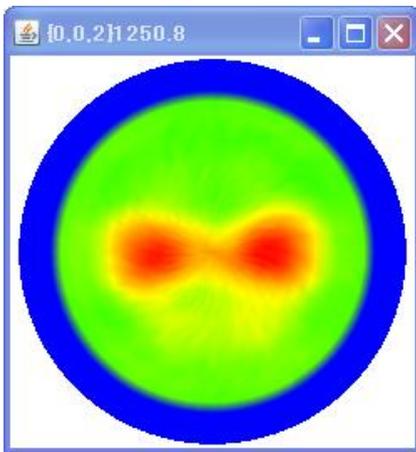


Fig-01

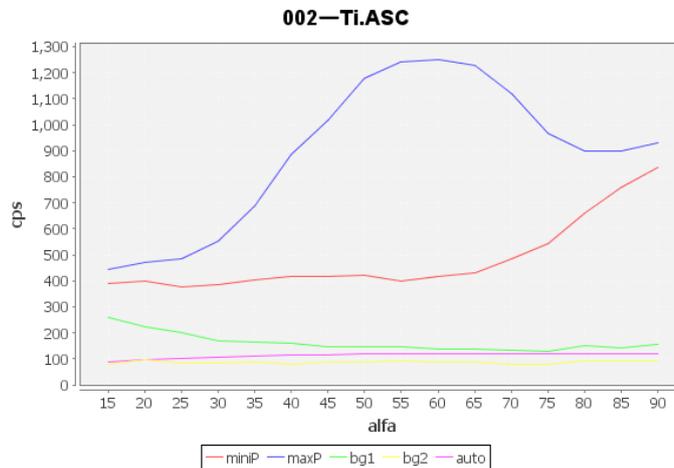
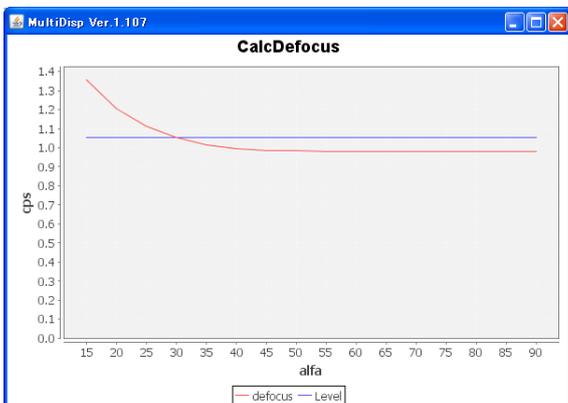


Fig-02

Fig-02 はバックグラウンド除去の為に、バックグラウンドプロフィールで、横軸は極点図の  $\alpha$  軸、極点図の中心が  $90.0$  度、極点図の外側が  $0.0$  度、青色のプロファイルは、極点図(Fig-01)各  $\alpha$  軸に対する回転方向  $\beta$  軸の最大強度、赤色のプロファイルは、極点図(Fig-01)各  $\alpha$  軸に対する回転方向  $\beta$  軸の最小強度、緑色、黄色はバックグラウンド強度を表す。バックグラウンドの強度が極点図の外側で上がる傾向がある。紫色プロファイルは、理想バックグラウンドプロフィールである。バックグラウンド処理はこの理想プロフィールで処理される。



0.95 以下をカットする。

Fig-03

Fig-03 は、測定  $2\theta$  角度 38.34 度と受光スリット 7mm から計算される defocus 曲線である。  
補正量の小さい部分を抽出するため、limit を 0.95 とした  
バックグラウンド処理と defocus 補正を行う。(Fig-04)

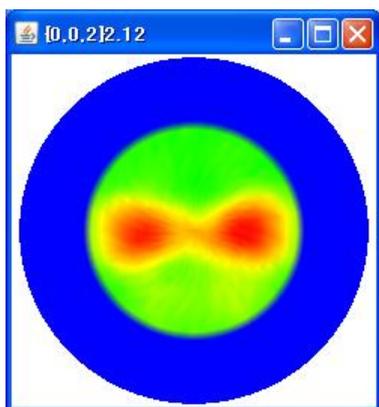


Fig-04

補正を行った結果は入力データと同じディレクトリに TXT2 ファイルとして保存されている。

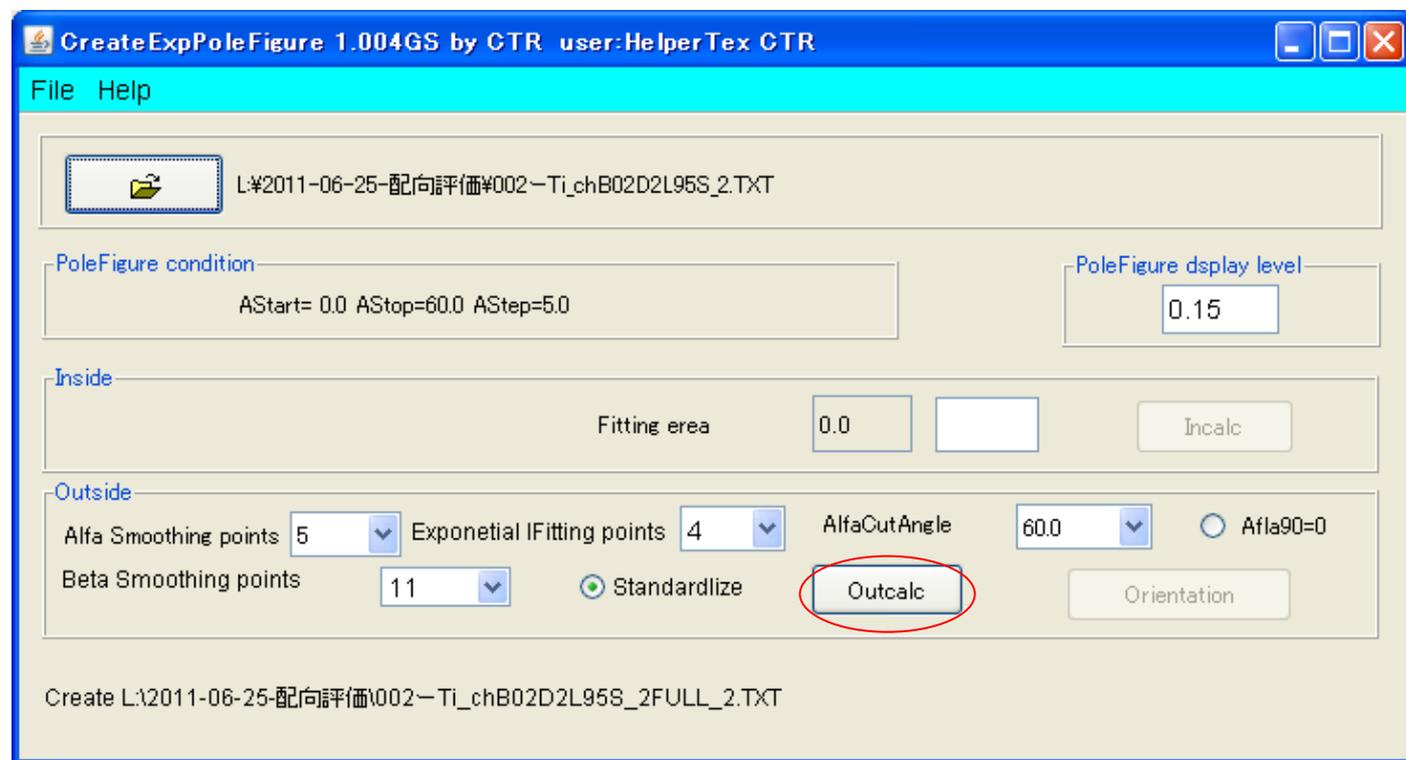
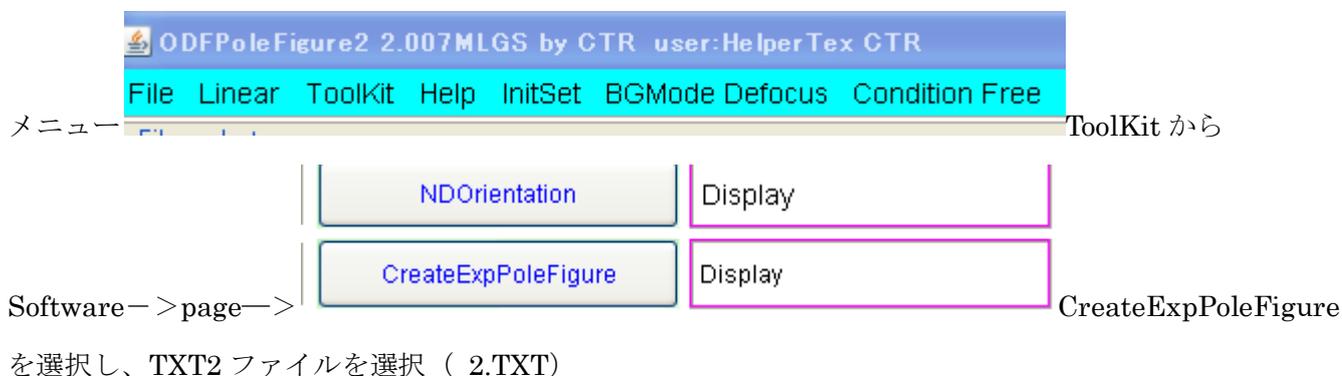


Fig-05

ドーナツ型の場合、極点図の中心部も内挿出来る。

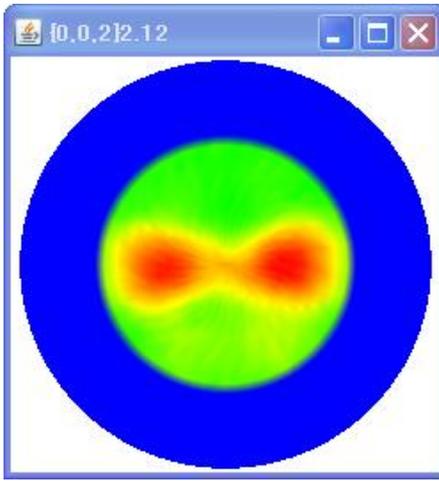


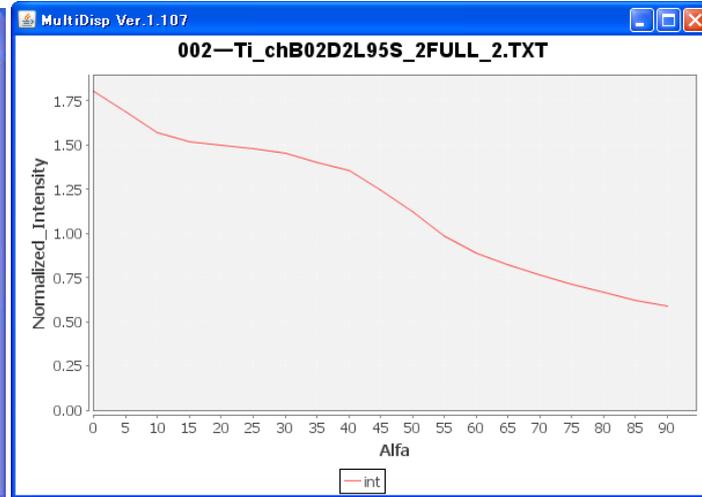
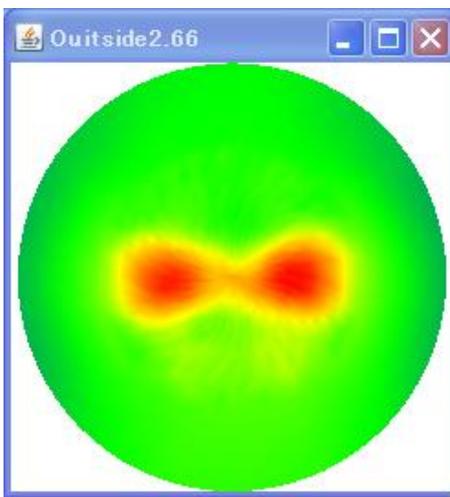
Fig-06



Fig-07

Fig-06 は入力極点図、Fig-07 は  $\beta$  方向の平均値を  $\alpha$  軸に対してプロットしている。

Fig-06 を Outside で外挿



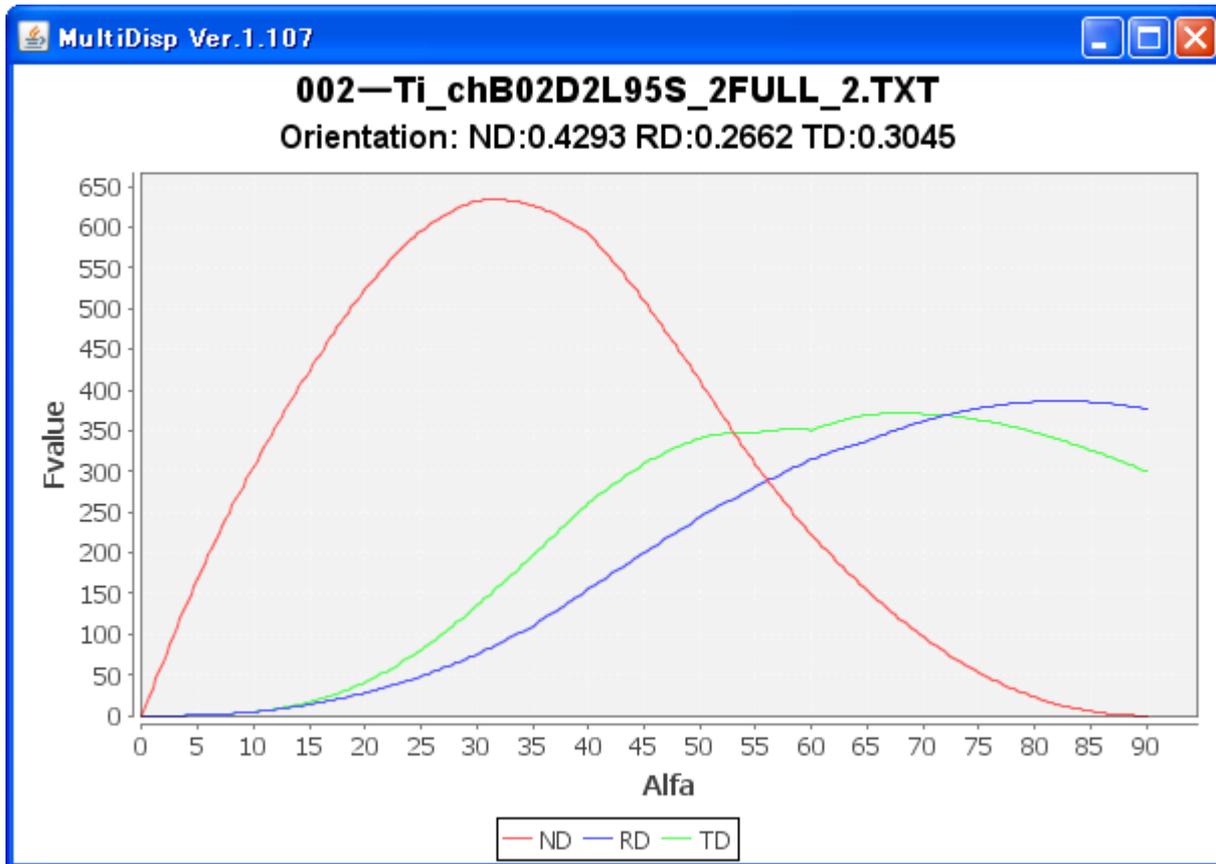
完全極点図から配向度関数を計算

Fig-05 の Orientation で配向関数を計算する。



ND方向とTD方向への偏りが数値化出来る。

File -> PrintDisplay で



印刷出力イメージを表示する。

表示しているファイル名から、

B02: low,high バックグラウンドデータから理想バックグラウンドを算出しバック除去が行われた

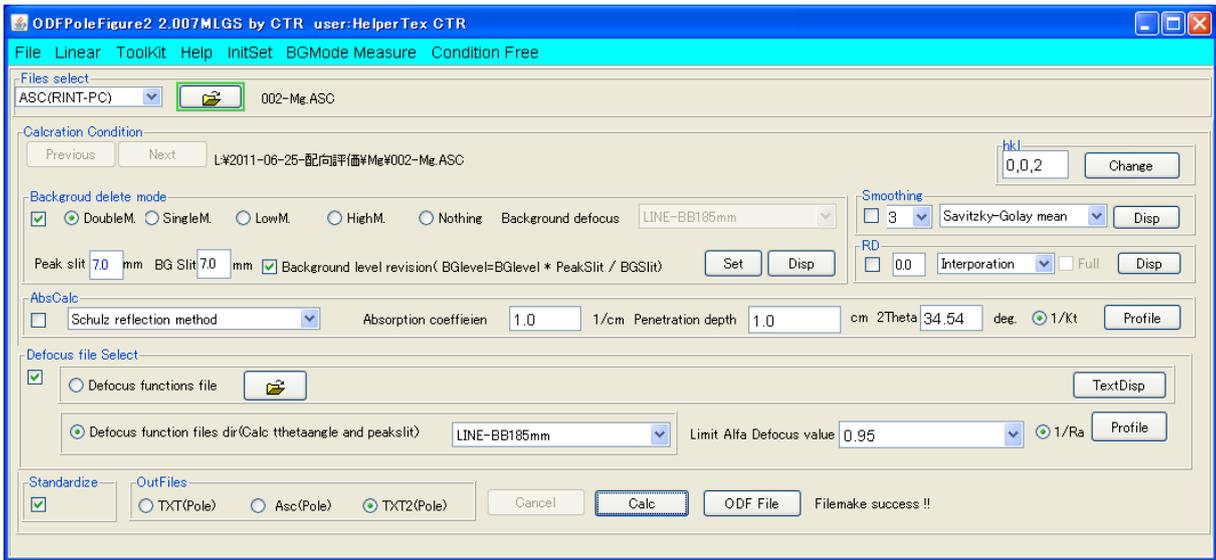
D2L95: 計算 defocus 処理を行い、defocus 補正は 95%以上のデータ

S: 強度の規格化を行った

\_2.TXT:  $\alpha$ 、 $\beta$ 、強度データ

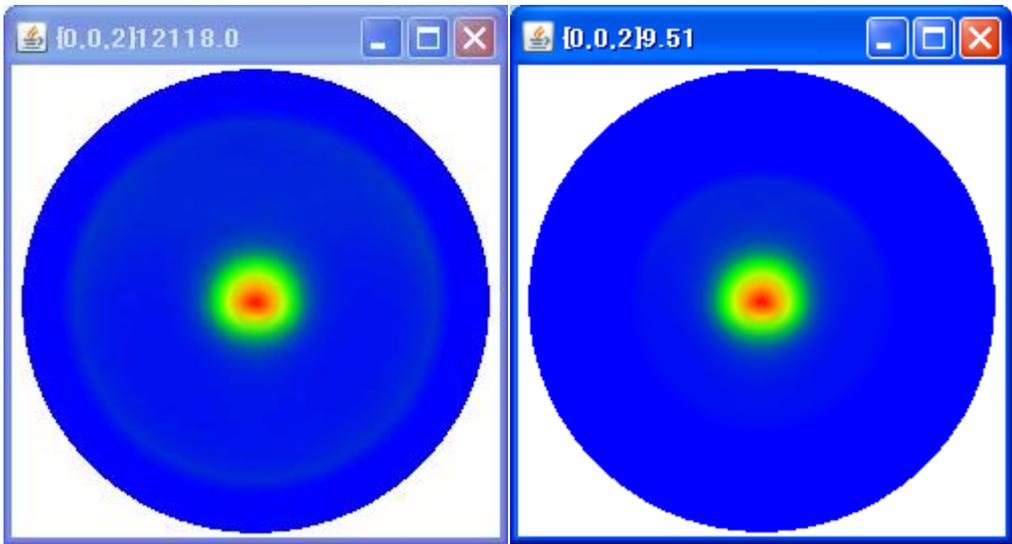
ND,RD,TD 方向の配向度関数が計算されている。

1つ目極点図、ODFPoleFigure2 ソフトウェアによる精密な極点処理



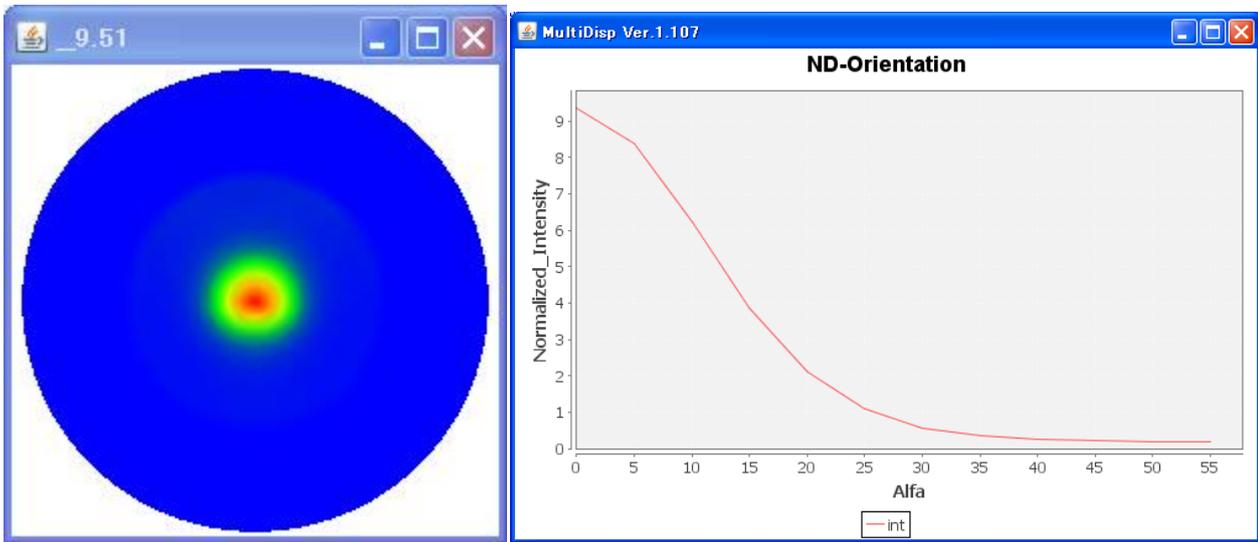
入力極点図

処理結果 (不完全極点図の規格化強度で示される)



中心のみの評価として、ND 方向のみ、 $\beta$  方向の平均値で扱える。(NDOrientation ソフトウェア)

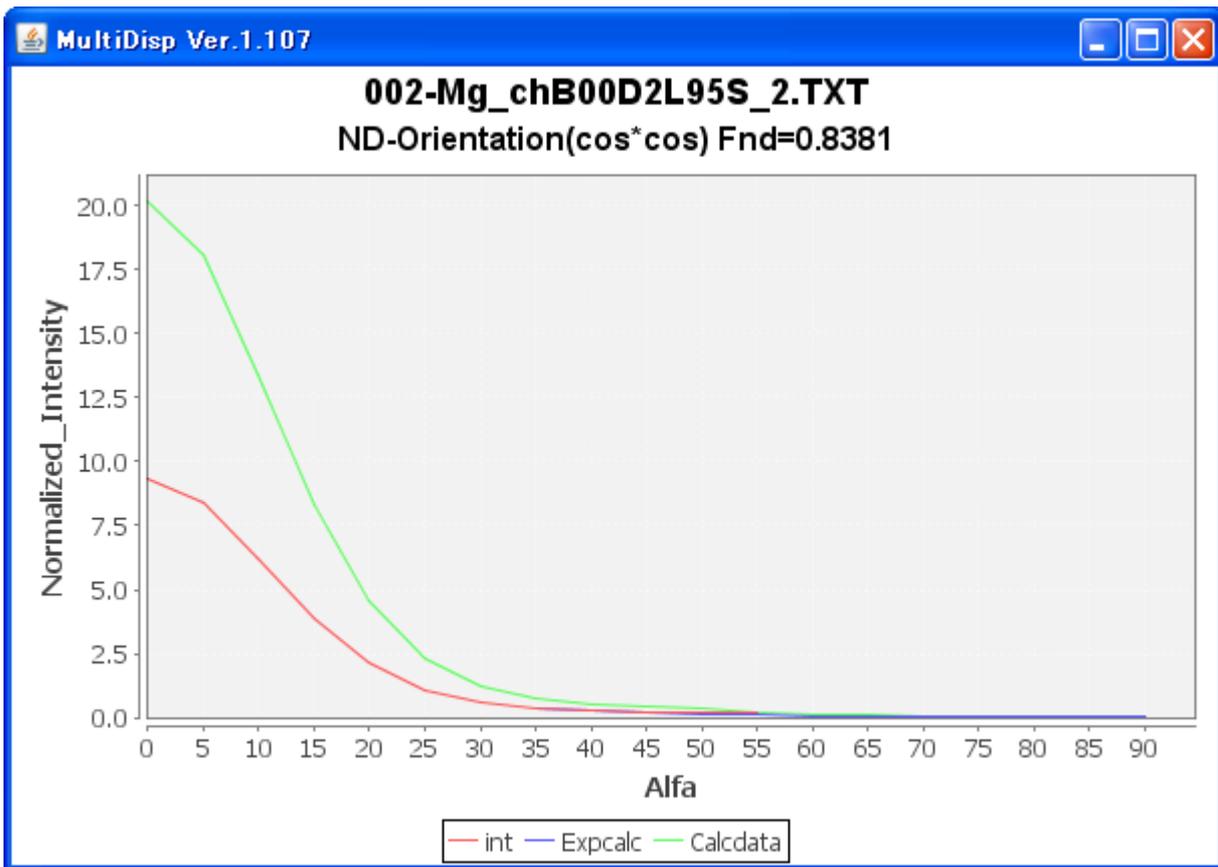




Fitting scope (Exp)

Fitting Calc   
 start    
 stop    
 cos\*cos   
   

指数関数を  $\alpha$  軸 35 度から 55 度のデータから外挿し、強度の規格化を行い、ND 方向配向度関数を計算



表示しているファイル名から、

B00 : 測定された low,high バックグラウンドデータからバック除去が行われている

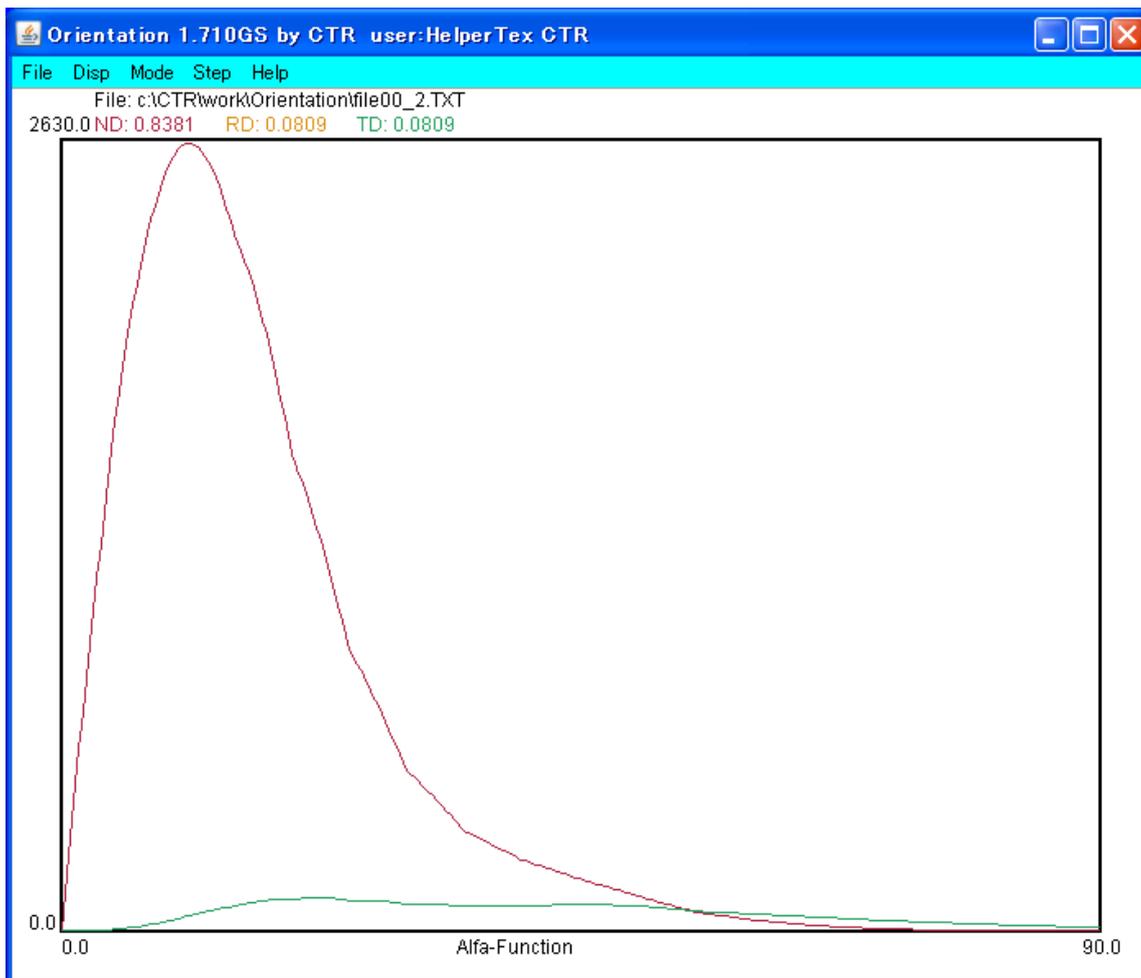
D2L95: 計算 defocus 処理を行い、defocus 補正は 95%以上の極点図

S: 強度の規格化を行った

\_2.TXT :  $\alpha$ 、 $\beta$ 、強度データ

cos\*cos: 高木氏などの方法ではなく、通常の配向度関数 Fnd 計算結果が 0.8381 であることが分かる。

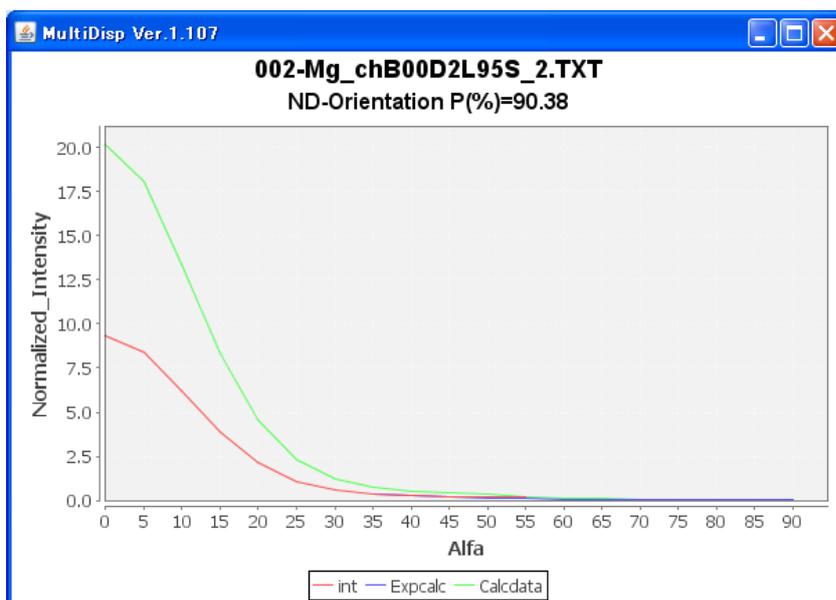
ND, RD, TDを計算する Orientation ソフトウェアで完全極点図から配向度関数を計算すると、



磁性特性と配向



cos\*cos チェックを外して計算する。



90.38%と計算される。