

高分子シリーズ

## 配向度 (Degree of Preferred Orientation)

2015年02月08日

*HelperTex Office*

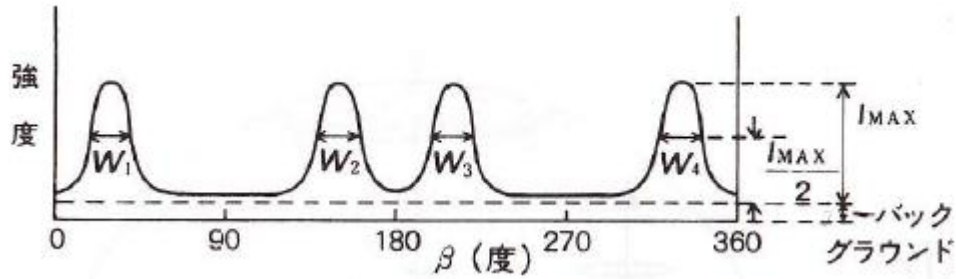
山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

不明な点は問い合わせ下さい。

## 1. 概要

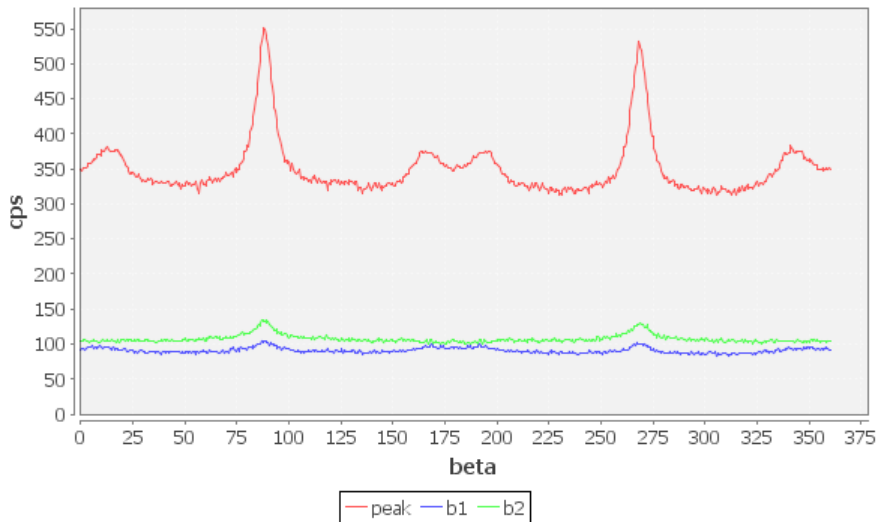
高分子の配向解析を、角戸、笠井「高分子 X 線解析」手法の半価幅から求める手法で  $\beta$  プロファイルの半価幅から計算する方法である。



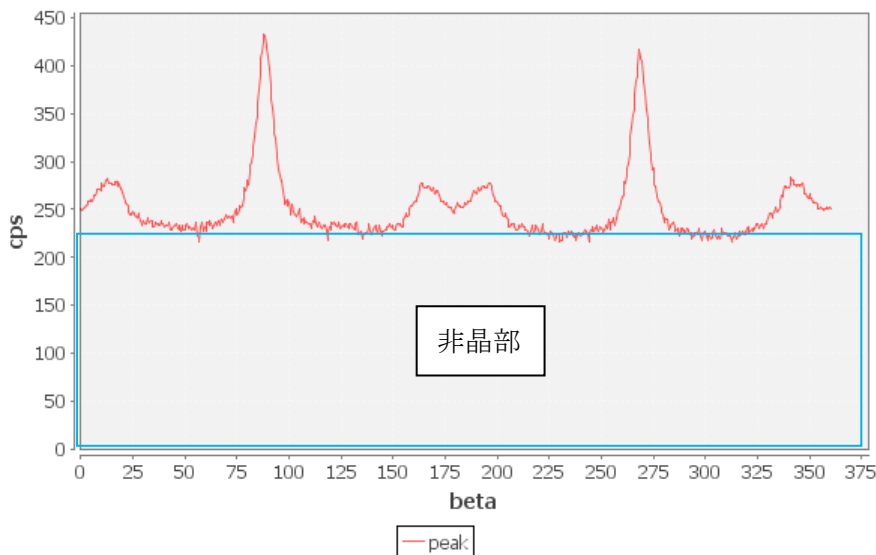
$$\text{配向度: } A(\%) \quad A = \frac{360 - \sum W_i}{360} \times 100 (W: \text{度})$$

random試料では、ピークは存在しないので、半価幅は最大になり配向度 = 0 %  
単結晶の場合、半価幅は最小になり、配向度 = 100 %となる。

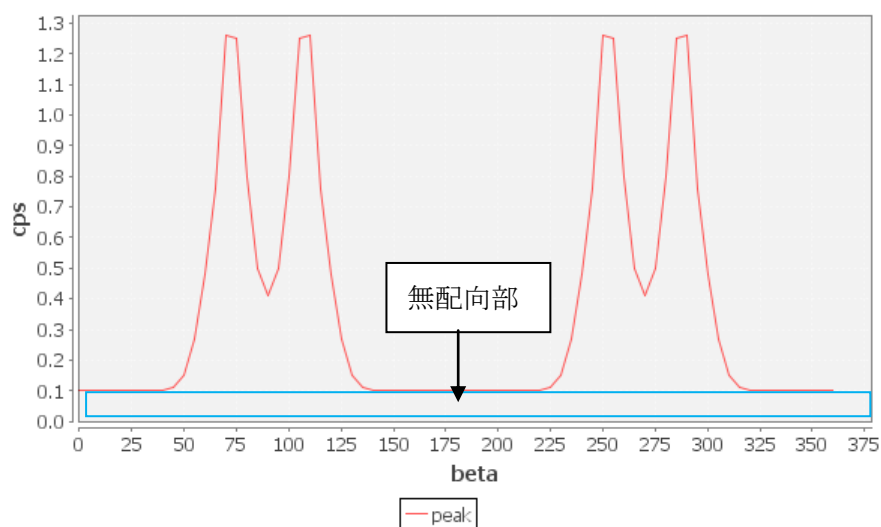
しかしながら、実際に測定すると、 $\beta$  プロファイルとバックグラウンド強度で以下の図の様な事もあり、



バックグラウンドを削除しても、半価幅が計算出来ないケースがあります。



又、80%の結晶方位と20%のrandomが含まれているケースもあります。



この様に、バックグラウンドを削除したプロファイルの最小値以下を下記の部分として配向度を計算する。

非晶部 (Amorphous)

無配向部 (Random)

非晶部とした場合 (Amorphous)

非晶部も削除し、

$$PO (\%) = (360 - \sum W_i) / 360 * 100$$

無配向部とした場合 (Random (A-M) / A)

$$PO (\%) = (360 - \sum W_i) / 360 * (A - M) / A * 100$$

A : プロファイルの積分強度

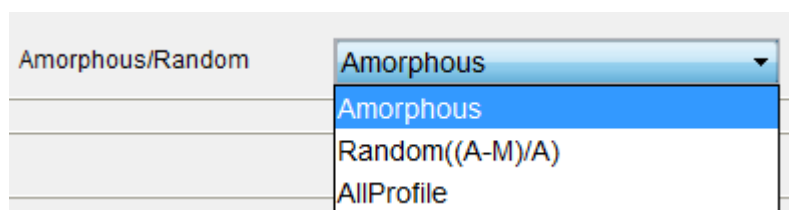
B : 無配向部の積分強度

無配向部も含めた全プロファイルで計算する場合 (AllProfile)

注意 : 無配向部分が大きいと半価幅計算に失敗します。

$$PO (\%) = (360 - \sum W_i) / 360 * 100$$

機能選択

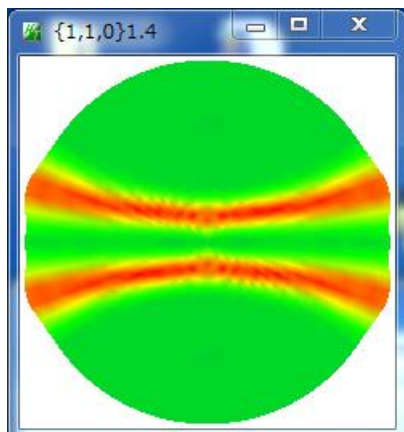


## 機能評価

従来、1軸配向で VolumeFraction が異なるデータを解析する場合、random部分を差し引いて評価すると、PO%は同じ値になっていますが、

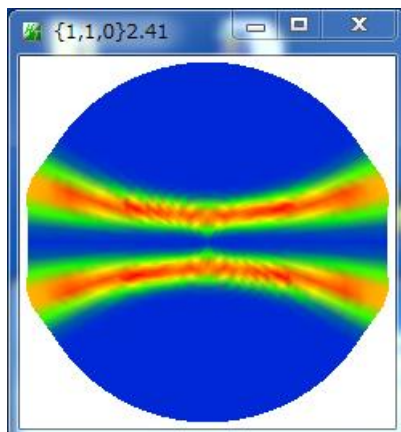
Random  $((A-M) / M)$  や、Randomとして扱う場合、区別が出来ます。

VF=40%,FWHM=10deg



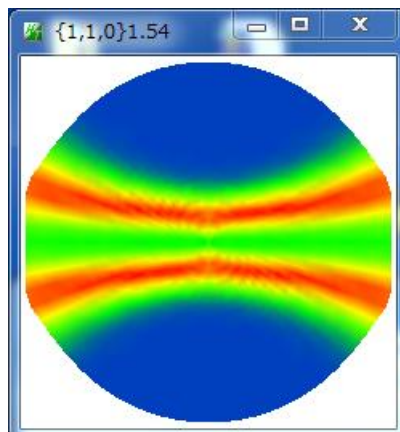
FWHM: 13.59 13.59 13.59 13.59  
PO = 84.896 % (Mode:Amorphous)

VF=80%,FWHM=10deg



FWHM: 13.91 13.91 13.91 13.91  
PO = 84.549 % (Mode:Amorphous)

VF=80%,FWHM=20deg.



FWHM: 18.59 18.59 18.59 18.59  
PO = 79.34 % (Mode:Amorphous)

FWHM: 13.59 13.59 13.59 13.59  
PO = 26.718 % (Mode:Random((A-M)/A))

FWHM: 13.91 13.91 13.91 13.91  
PO = 60.081 % (Mode:Random((A-M)/A))

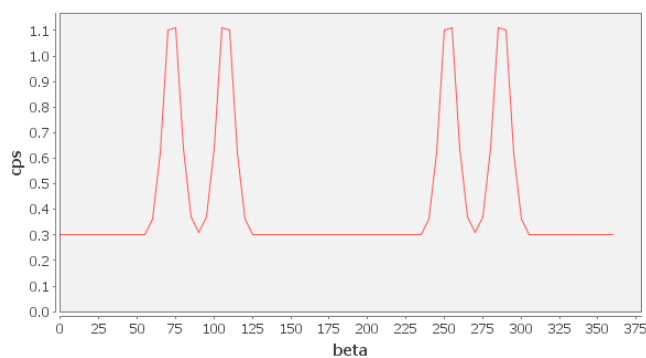
FWHM: 18.59 18.59 18.59 18.59  
PO = 57.897 % (Mode:Random((A-M)/A))

FWHM: 17.97 17.97 17.97 17.97  
PO = 80.035 % (Mode:AllProfile)

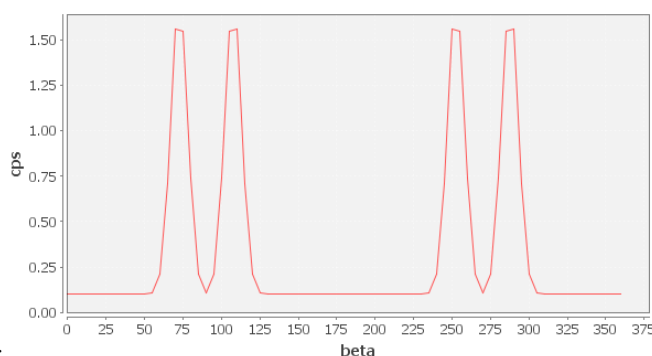
FWHM: 14.53 14.53 14.53 14.53  
PO = 83.854 % (Mode:AllProfile)

FWHM: 20.31 20.31 20.31 20.31  
PO = 77.431 % (Mode:AllProfile)

VolumeFraction40%-FWHM10deg と VolumeFraction80%-FWHM10deg の違いは Random 部分の大きさが異なるだけであるから、この部分を削除して評価する Amorphous 法では同じ結果になってしまう。Random 部分の評価も必要になるので、正確にバックグラウンド測定を行う事になります。



VF=40%,FWHM=10deg

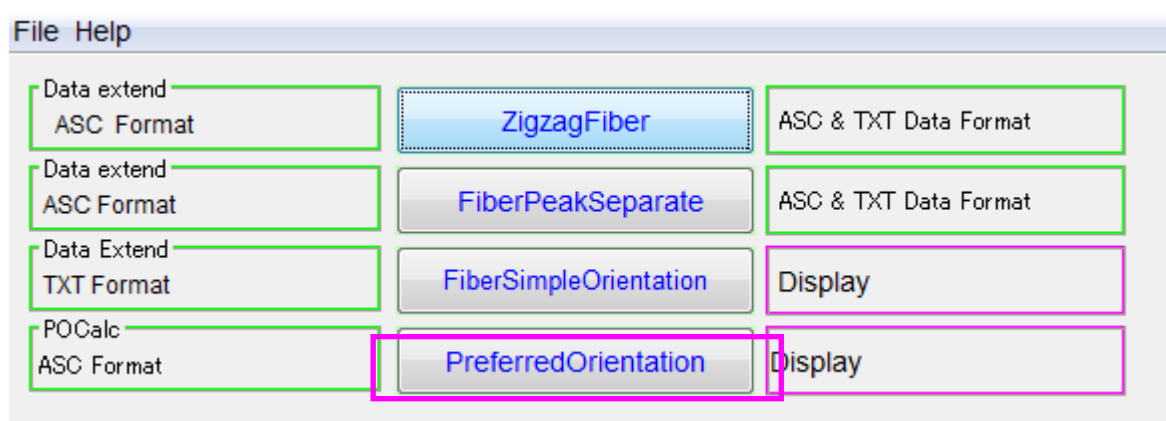
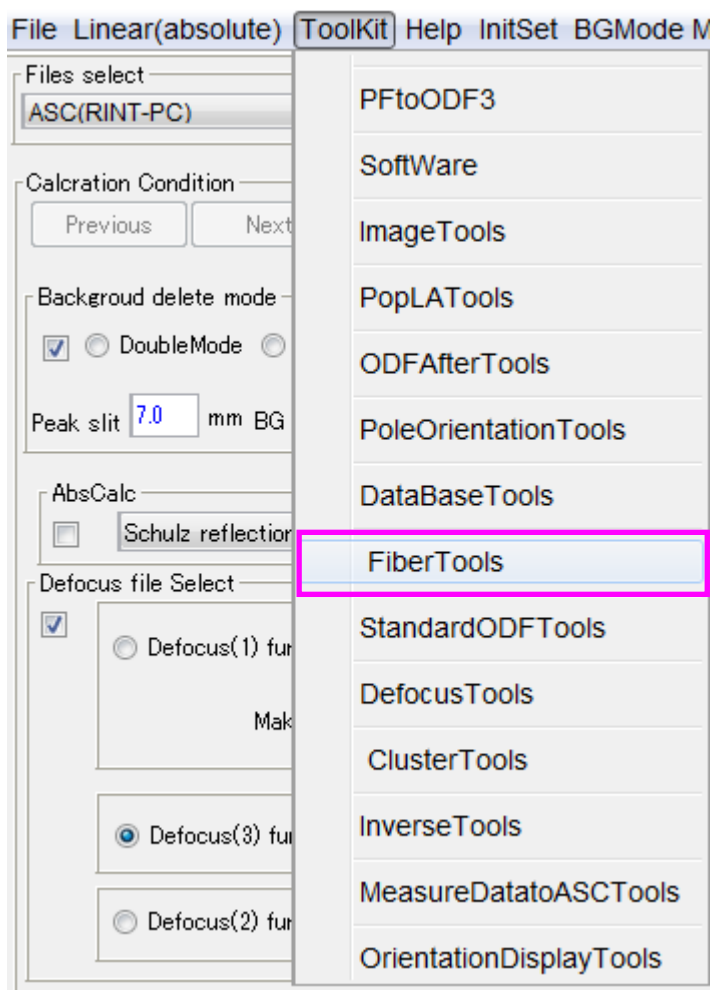


VF=80%,FWHM=10deg

## 2. プログラムの立ち上げ

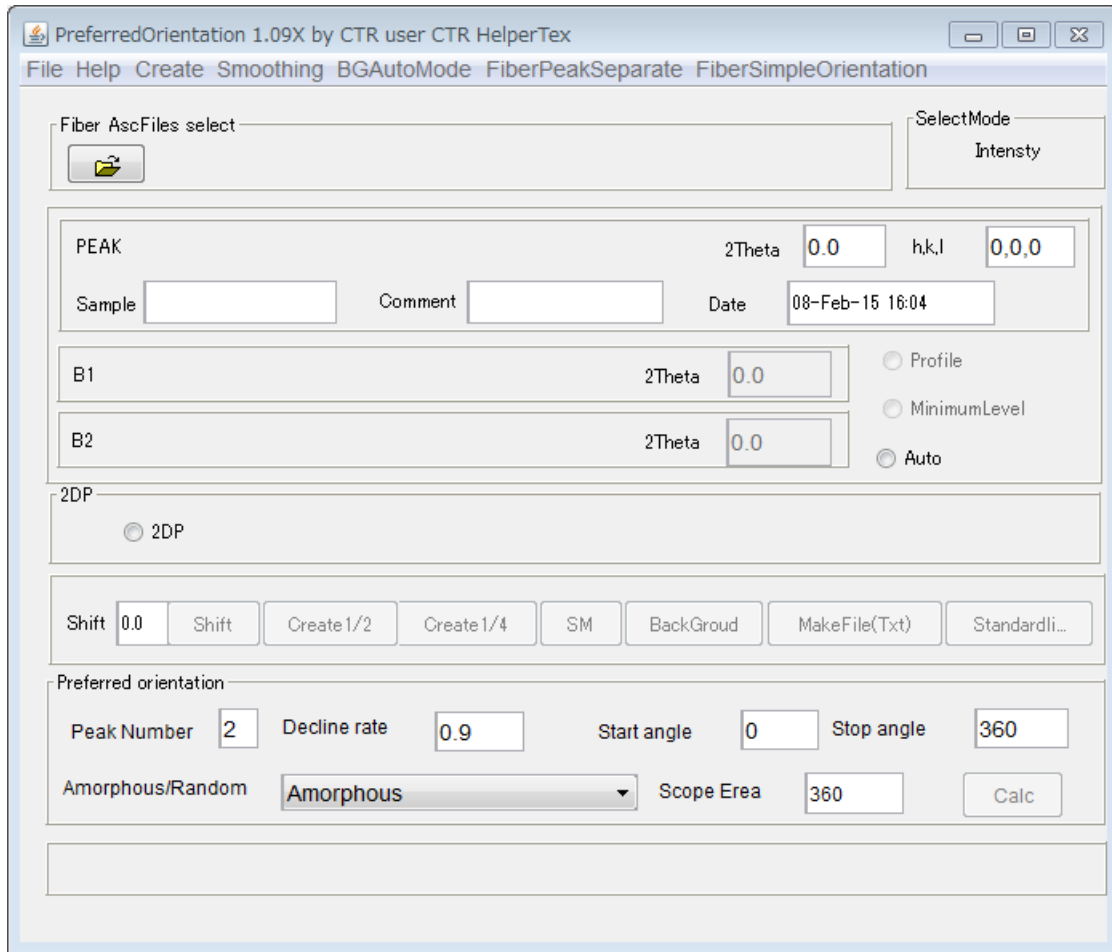
C:\¥CTR¥bin¥PreferredOrientation.jar をダブルクリック

ODFPoleFigure2 -> ToolKit -> FiberTools -> PreferredOrientation 選択

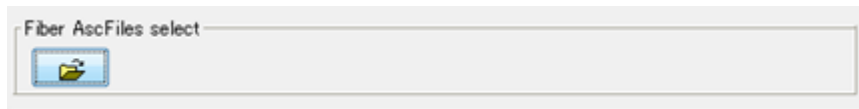


### 3. ソフトウェアの使い方

ZigzagFiber から波及しているため、基本部分は ZigzagFiber を参考にして下さい。



#### 3. 1 ファイル選択



極点データや、繊維試料台で測定したASCデータを入力します。

1 データの場合、ASCデータからバックグラウンドを読み込みます。

2. 3データの場合、PEAKファイル、バックグラウンドファイルを読み込みます。

#### 3. 2 データ加工



データのシフト

ビームストップの影響を改善

平滑化

バックグラウンド削除

PO計算用ファイル作成

#### 4. PO計算

計算するピーク本数指定

PO計算範囲

Preferred orientation

Peak Number  Decline rate  Start angle  Stop angle

Amorphous/Random  Scope Erea

ピーク検索パラメータ

Decline rate

ピーク検出は強度の高い順に決定する。

0.9を指定すると、Max強度から10%下がった強度より強いピークがサーチを行い  
検出本数に足りない場合、更に10%下げてサーチする。

指定本数検出で終了する。

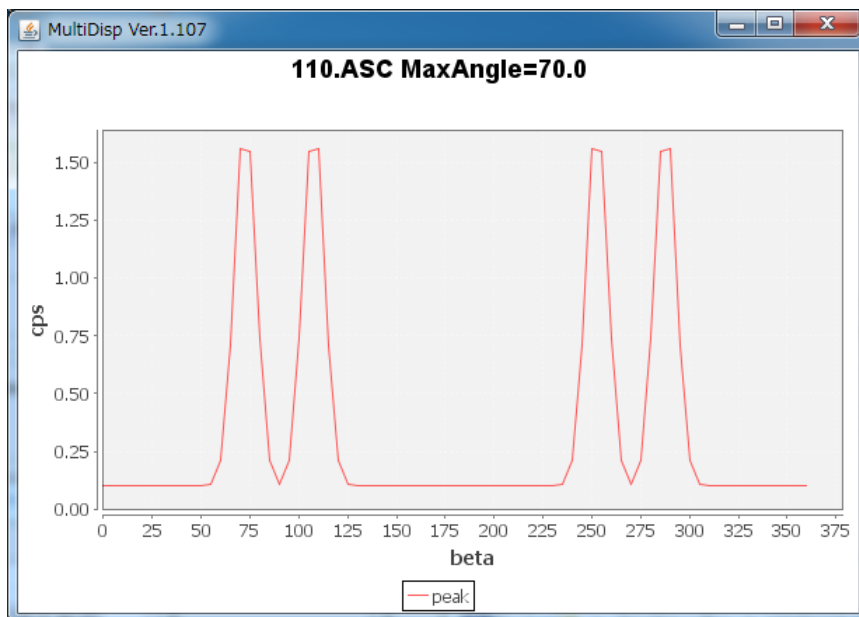
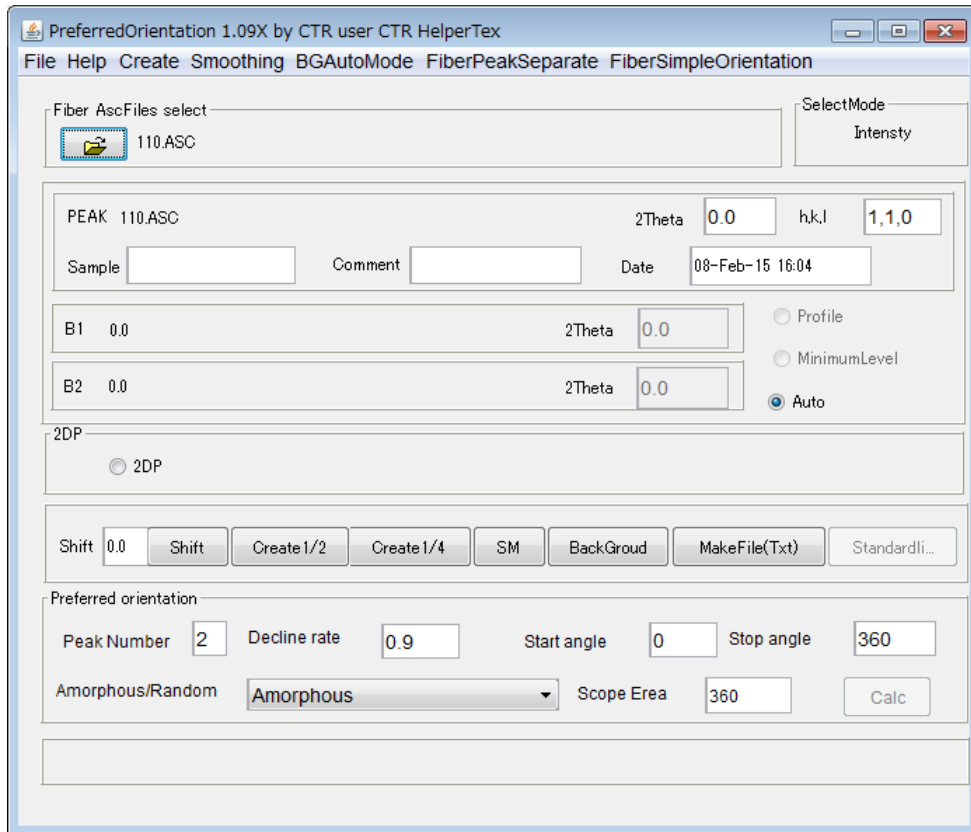
計算方法の指定

Amorphous/Random

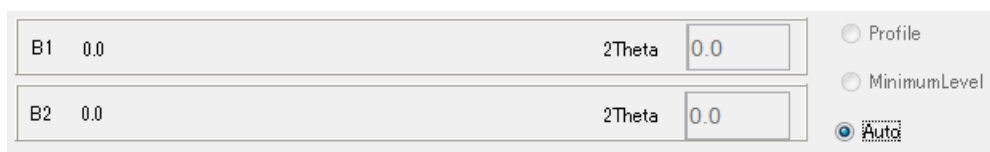
- Amorphous
- Random((A-M)/A)
- AllProfile

## 5. テストデータの評価

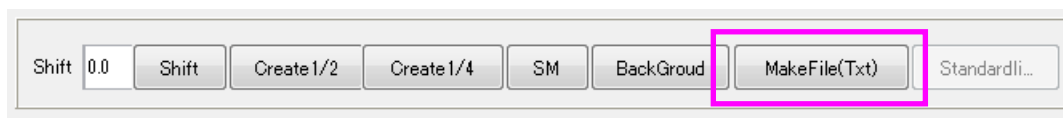
C:\¥CTR¥DATA¥1Axis-Polypropylene¥80%-20deg-ND¥110.ASC



バックグラウンド部分にデータ表示がないので、バックグラウンドデータがありません。



よって、データ加工しないで、PO計算を行います。



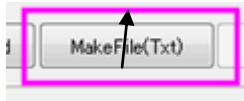


Preferred orientation

Peak Number  Decline rate  Start angle  Stop angle

Amorphous/Random

C:\CTR\DATA\1Axis-Polypropylene\80%-10deg-ND\110\_Calc.Txt make success !!



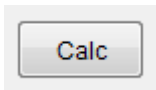
で表示されます。

検出すべきピーク本数を指定し、

Amorphous/Random

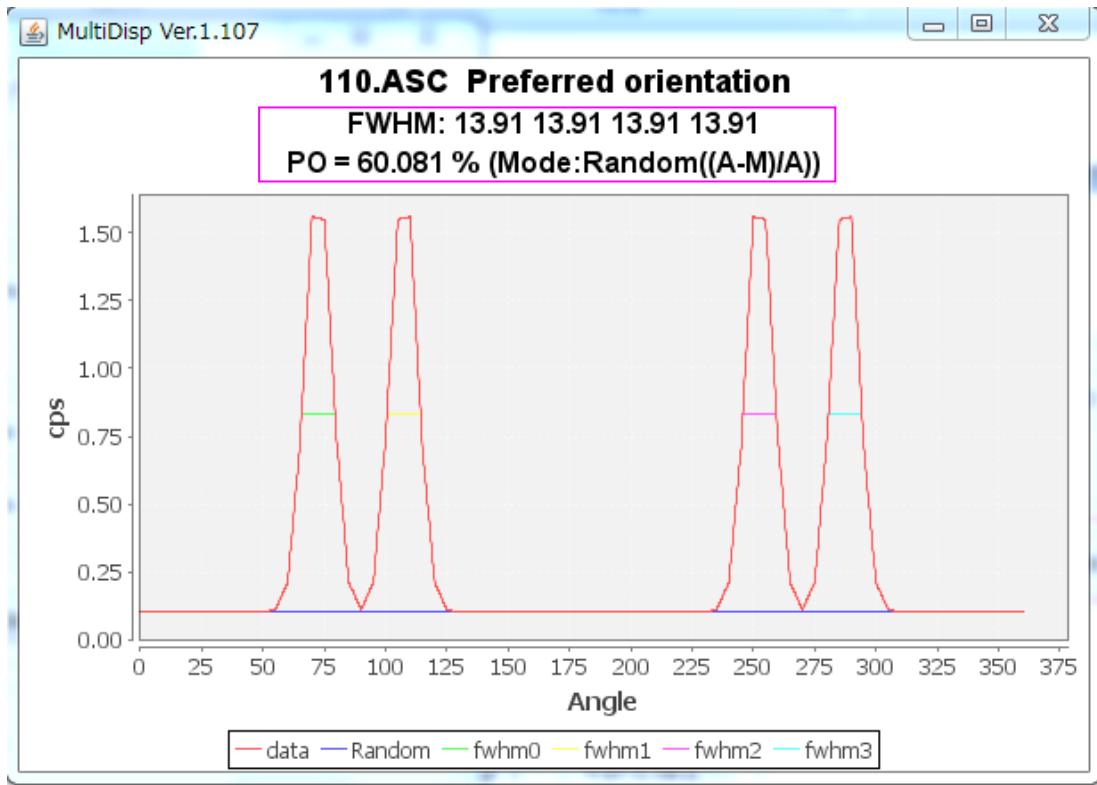
- Amorphous
- Amorphous
- Random((A-M)/A)
- AllProfile

でモード選択

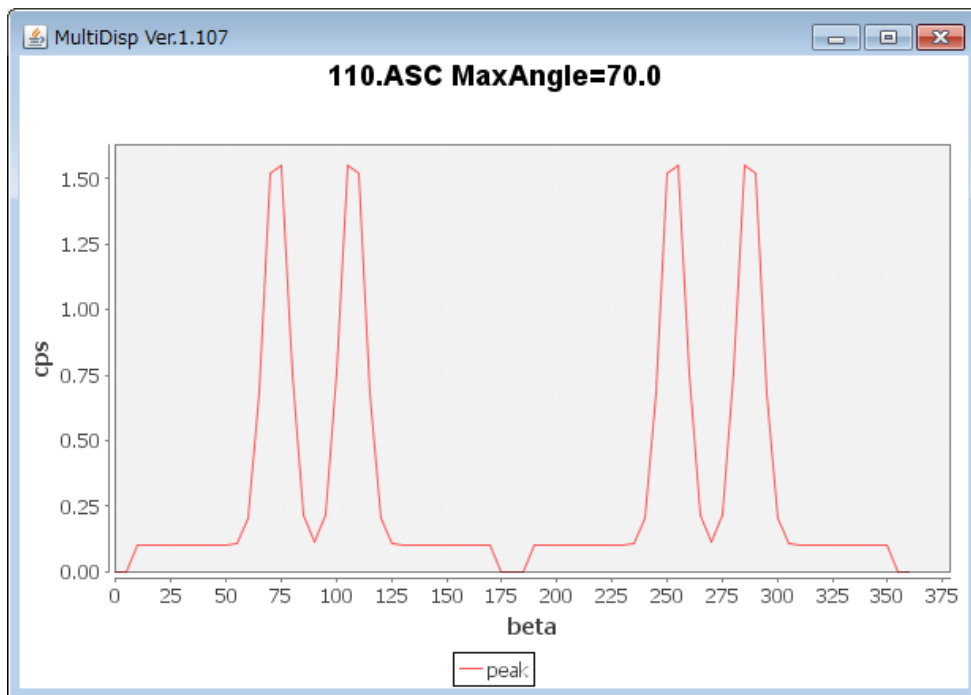
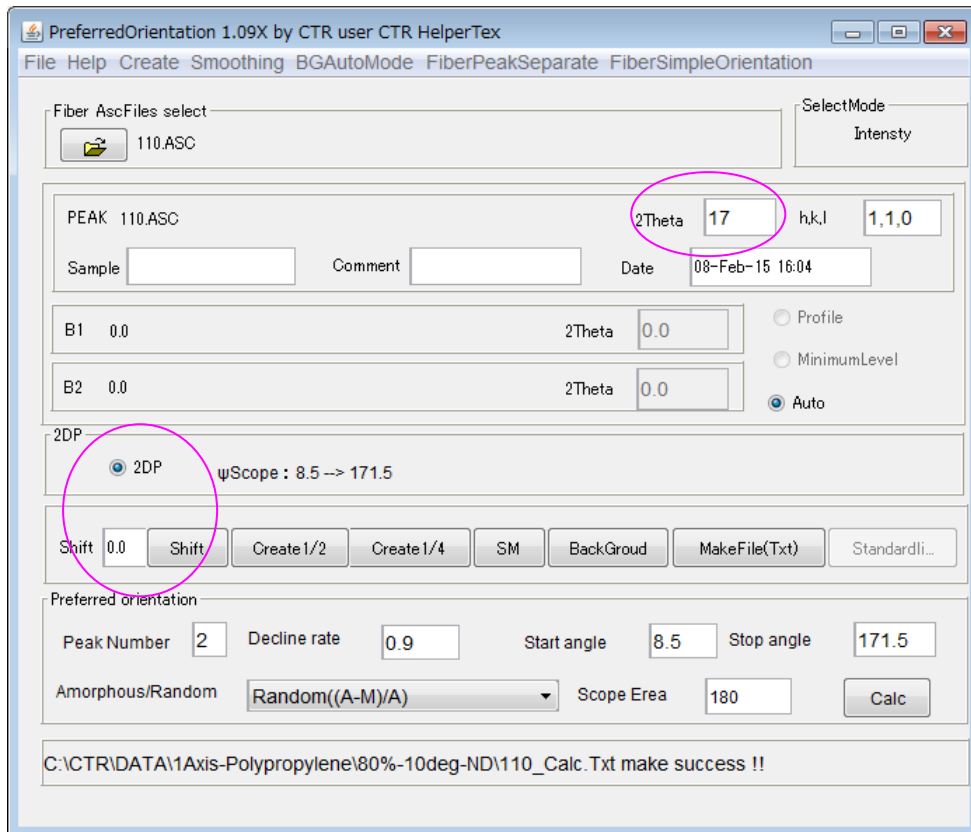


で計算を開始

半価幅とPO%が表示される。

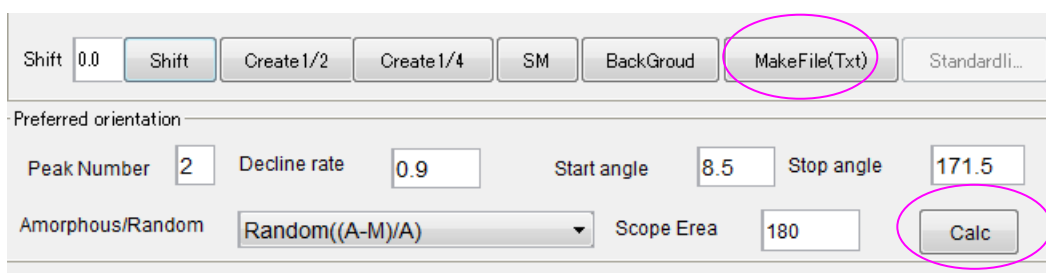


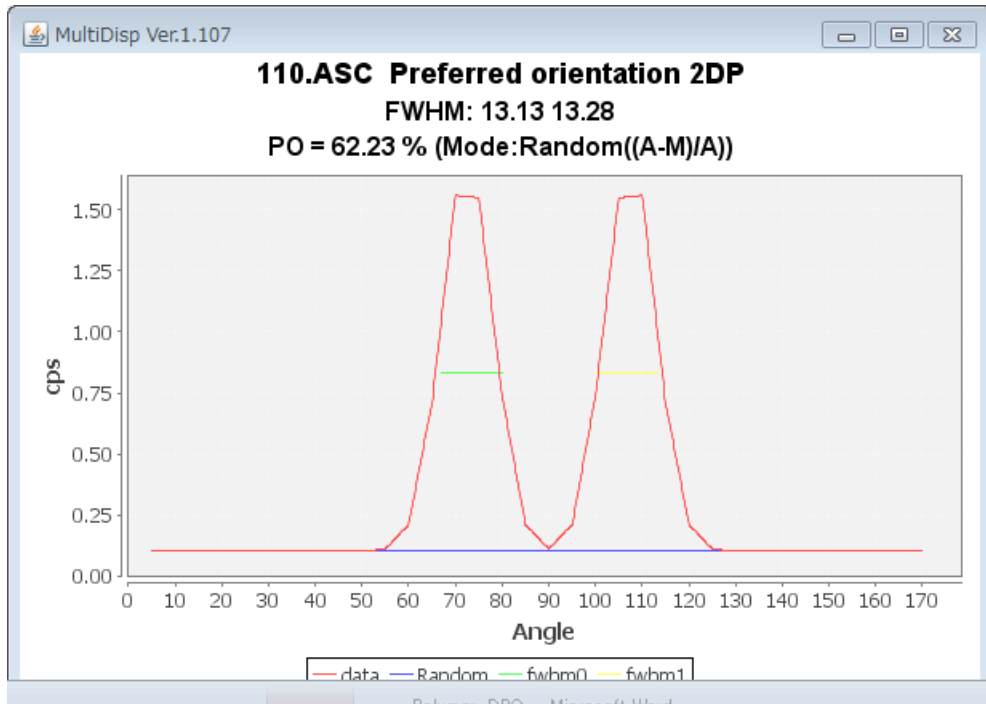
5. 1 二次元検出器の場合



範囲が狭く成ります。

この結果から計算する





半幅幅が狭くなり、結果として PO が大きく成ります。

## 6. 印刷

プロファイル画面を右クリックで印刷可能になります。

