

MTEXによるPETの解析

高分子材料の解析の場合、透過極点図と反射極点図は接続をしないでODF解析すると良い結果が得られます。

MTEXではLaboTexの様な結晶方位の定量 (VolumeFraction) は出来ないがCubicからTriclinicまで全ての材料のODF解析は可能です
ODF解析後の配向関数評価を示します。

2018年02月14日

HelperTex Office

概要

高分子材料では、PE, PP, PETの解析が行われているが、TriclinicであるPETは非常に難しい。フリーソフトウェアであるMTEXでどのように解析できるか検証してみます。

評価

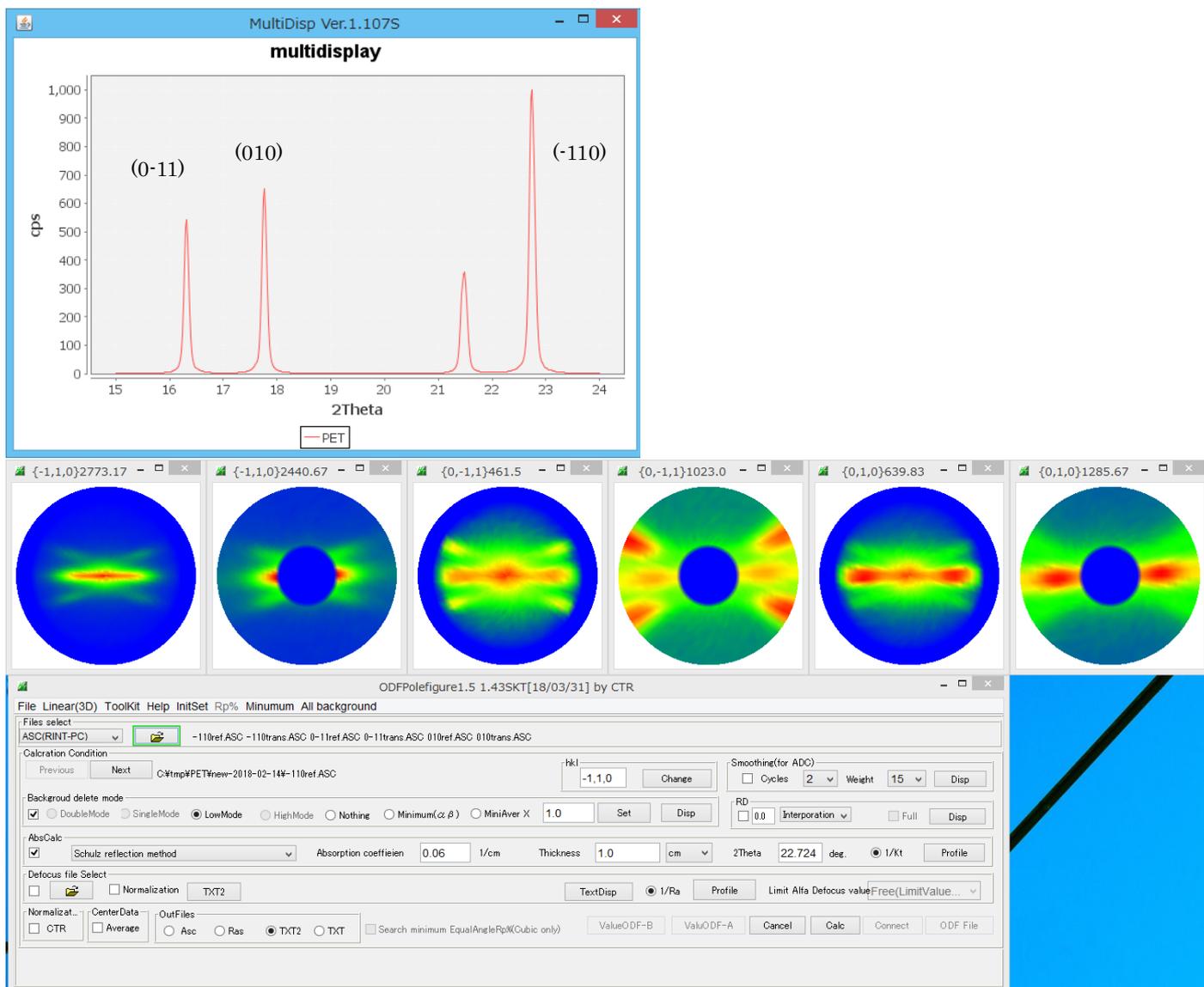
測定データの評価

バックグラウンドの設定 (高分子材料のバックグラウンド測定は非常に難しいので必ず修正する)

吸収補正、規格化を行う。

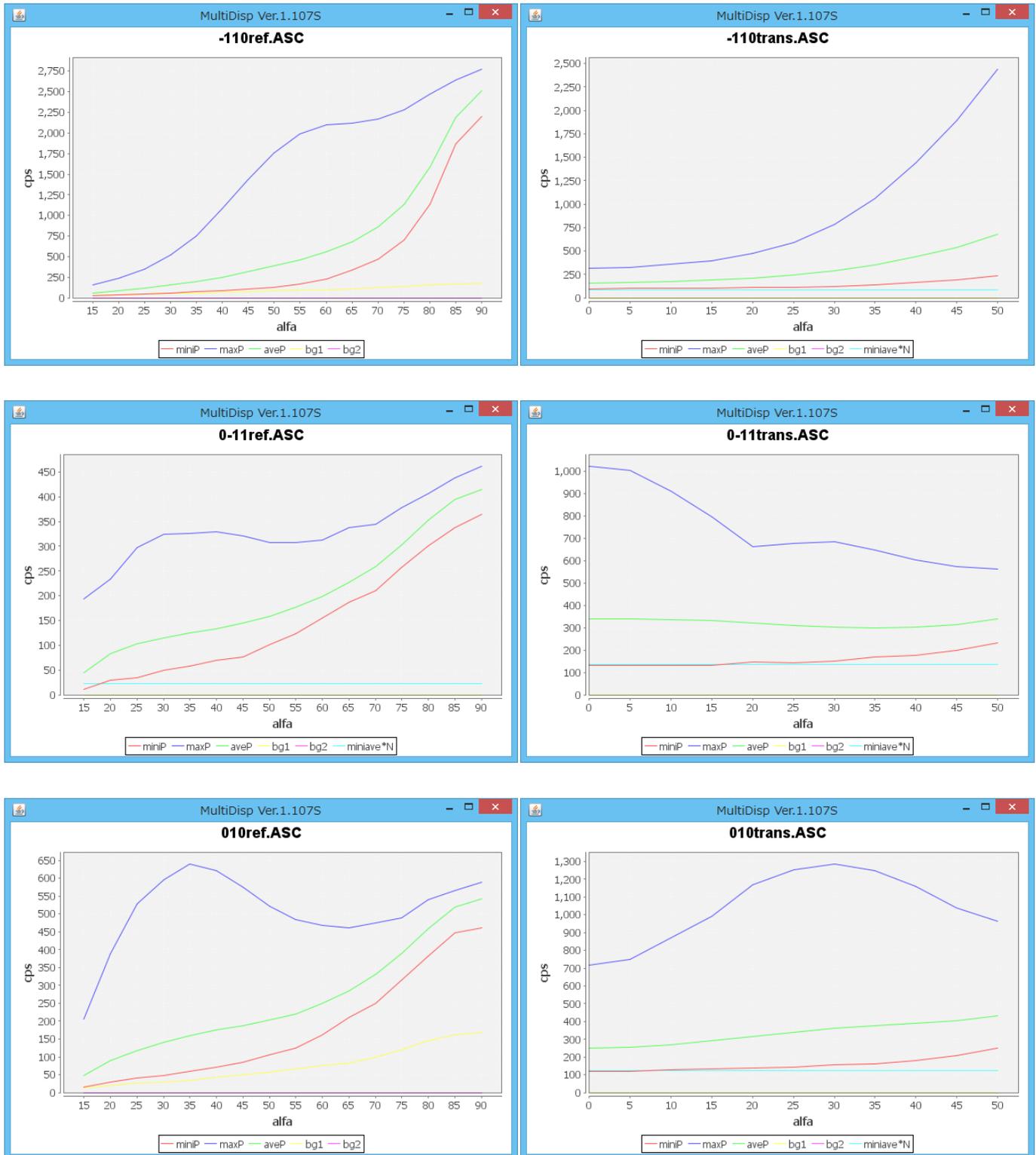
反射極点図の範囲を狭める (defocus補正を行わない為)

測定データ



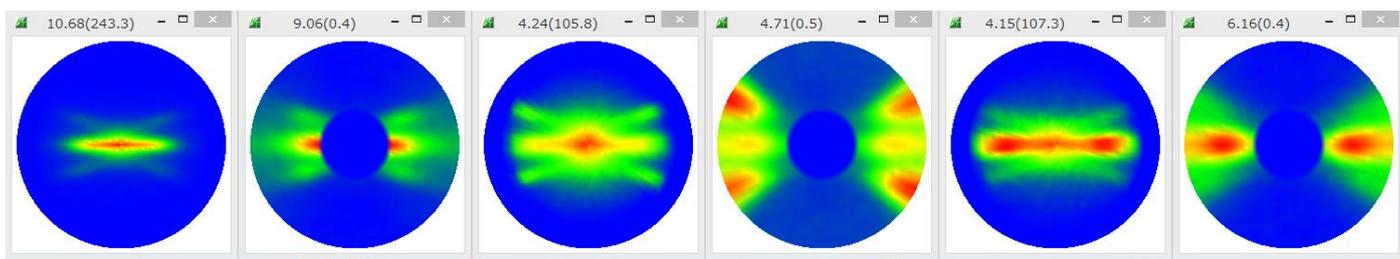
測定データ評価

修正バックグラウンドは、水色



defocus補正なしの為、反射極点図は50→90とする。
データの接続はPEで判明したように接続無しとする。

バックグラウンド除去、吸収補正、疑似規格化処理後



MT E X向けデータ作成

PftoODF3 8.33SKT[18/03/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material: PET.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 1 - C1 (triclinic)

a: 1.0, b: 1.3053, c: 2.374, alpha: 99.92, beta: 118.62, gamma: 111.37

Initialize: Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
-110ref_chB2US_2.TXT	-1,1,0	22.724	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
-110trans_chR0S_chB7US_2.TXT	-1,1,0	22.724	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
0-11ref_chB7US_2.TXT	0,-1,1	16.305	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
0-11trans_chR0S_chB7US_2.TXT	0,-1,1	16.305	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
010ref_chB2US_2.TXT	0,1,0	17.745	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
010trans_chR0S_chB7US_2.TXT	0,1,0	17.745	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>

反射範囲修正

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
-110ref_chB2US_2.TXT	-1,1,0	22.724	0.0->75.0	0.0	40	<input checked="" type="checkbox"/>
-110trans_chR0S_chB7US_2.TXT	-1,1,0	22.724	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
0-11ref_chB7US_2.TXT	0,-1,1	16.305	0.0->75.0	0.0	40	<input checked="" type="checkbox"/>
0-11trans_chR0S_chB7US_2.TXT	0,-1,1	16.305	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
010ref_chB2US_2.TXT	0,1,0	17.745	0.0->75.0	0.0	40	<input checked="" type="checkbox"/>
010trans_chR0S_chB7US_2.TXT	0,1,0	17.745	40.0->90.0	40.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>

MT E Xファイル作成

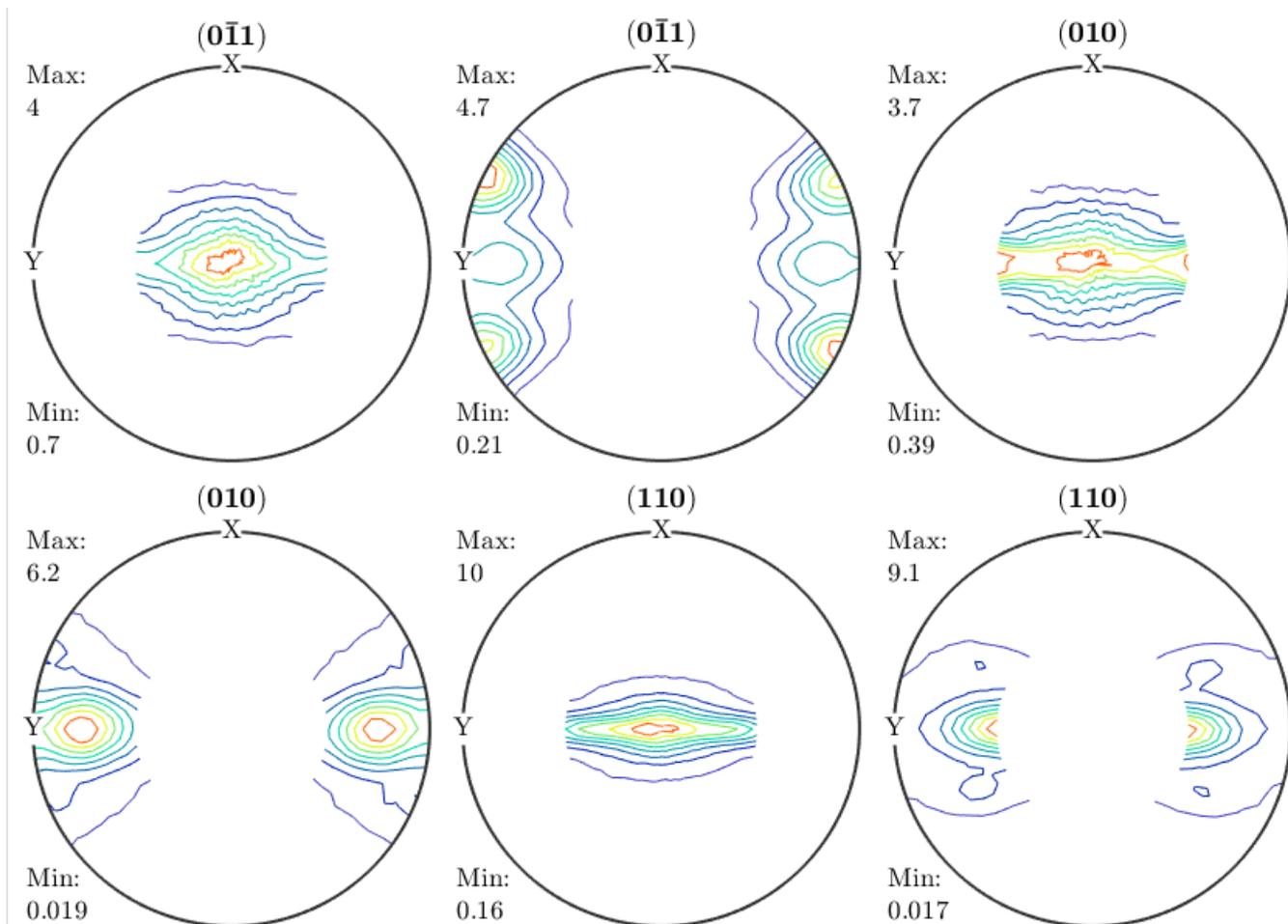
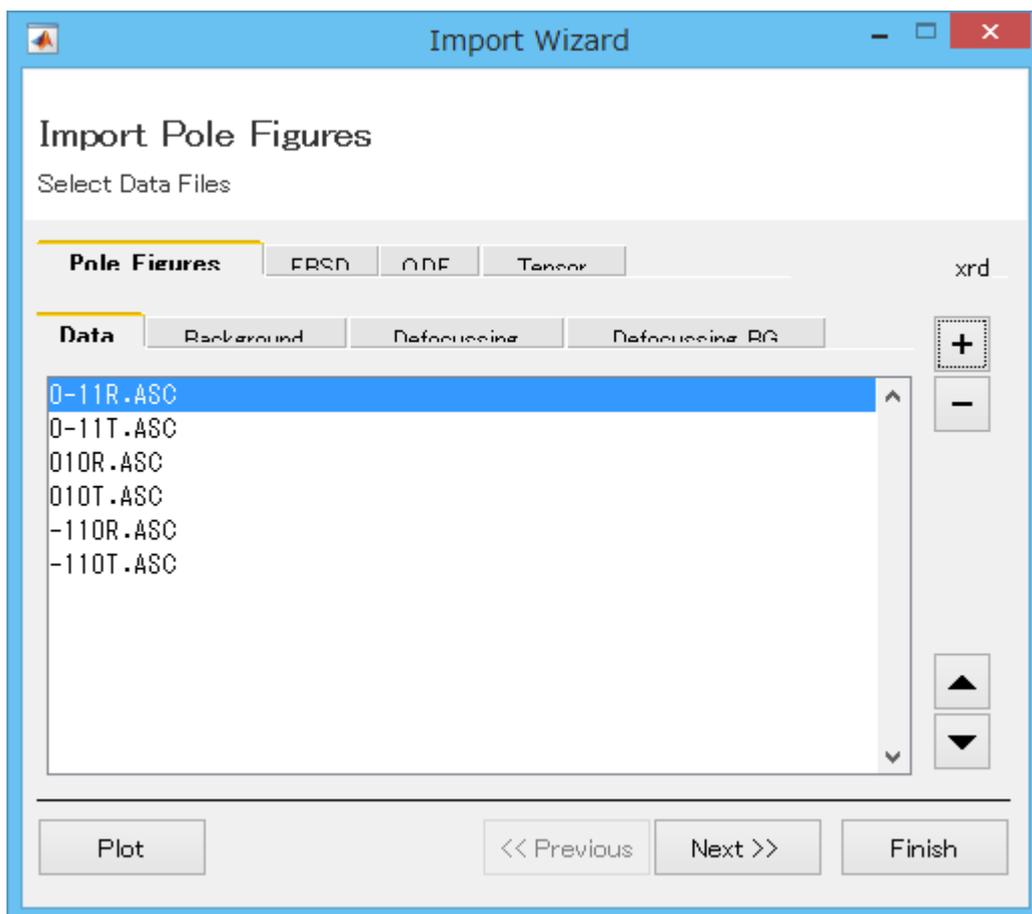
Comment: -110ref_chB2US_2.TXT -110trans_chR0S_chB7US_2.TXT 0-11ref_chB7US_2.TXT 0-11trans_chR0S_chB7US_2.TXT 011

Symmetric type: Full

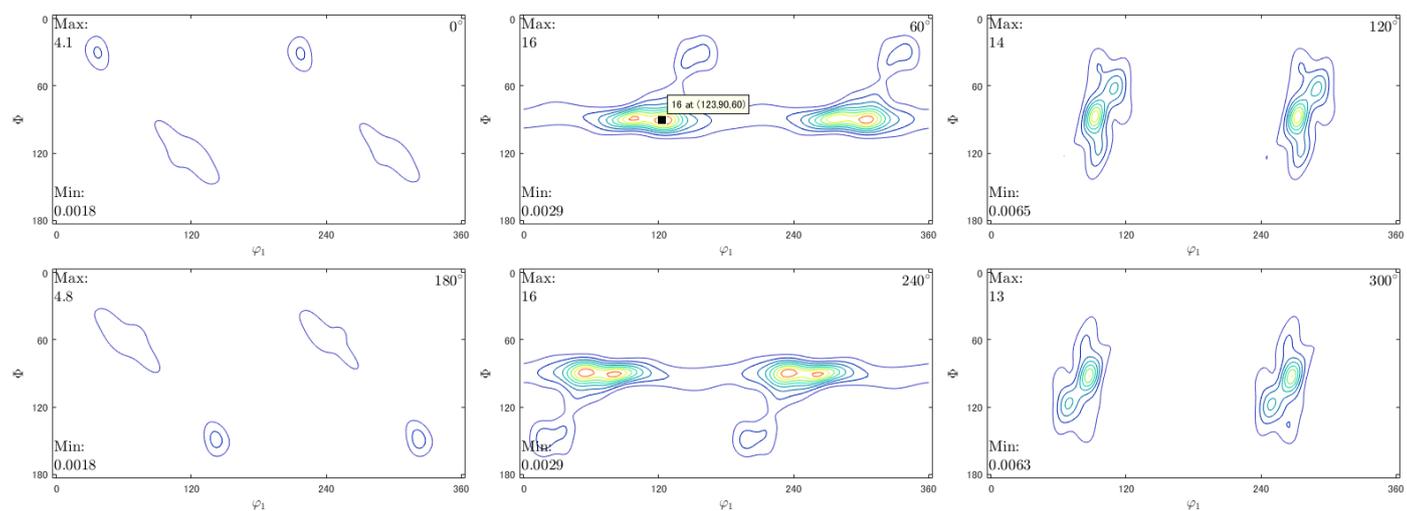
CenterData: Average

Asc file save

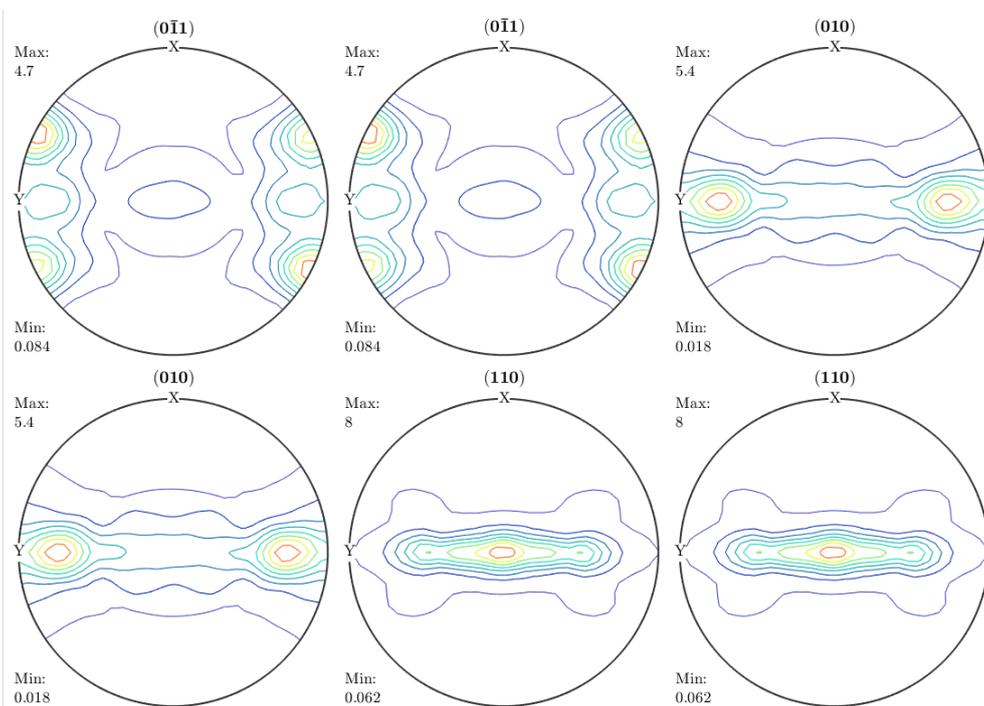
Labotex(EPF),popLA(RAW) filename: ASC



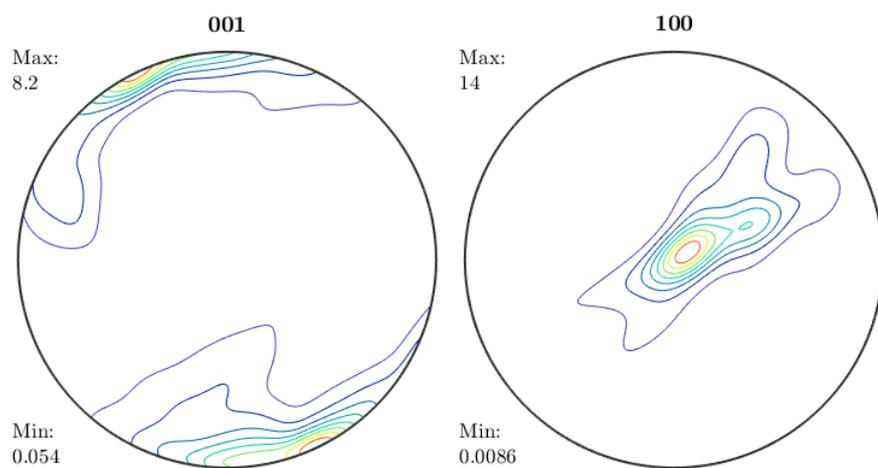
MTEXによるODF解析



再計算極点図



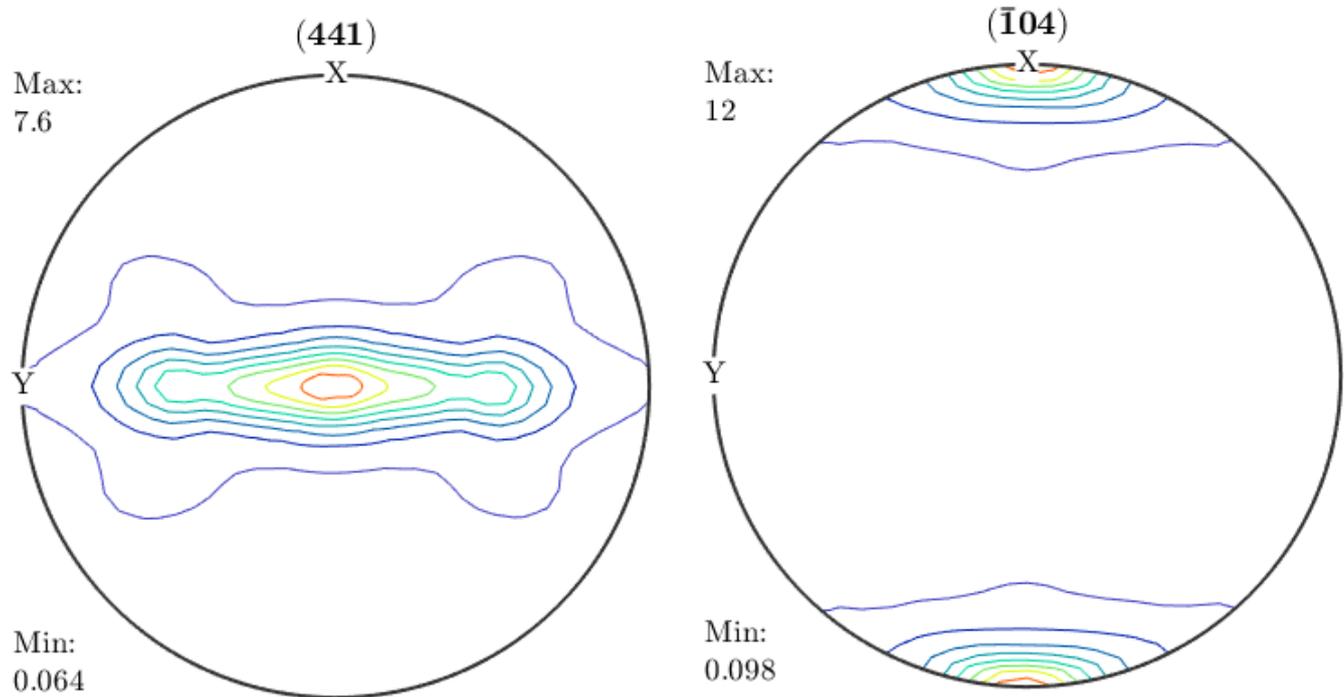
逆極点図 (NDとRD)



可能性の高い結晶方位

```
plot(calcPoleFigure(odf,[Miller(4,4,1,CS)],'contour')
```

```
plot(calcPoleFigure(odf,[Miller(-1,0,4,CS)],'contour')
```



{110} 極点図をExportして、配向関数を計算

