

高分子材料の配向度関数算出の為のデータ処理

Z i g z a g F i b e r ソフトウェア

Ver.No.1.02M

平滑化機能、バックグラウンド自動処理機能、**FiberPeakSeparate** 呼び出し、**FiberSimpleOrientation** 呼び出し機能が追加された新しいデータ処理

2016年09月12日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

概要

高分子材料の結晶軸と MD 方向の関係は配向度関数で評価されている。XRD では低角度の β -I プロファイル回折ピーク 2 本を用いて解析される。

繊維試料台、極点試料台、2次元ディテクタなどを用い、透過配置で β -I プロファイルを測定し、**平滑化**、**バックグラウンド**を削除し、ピーク分離を行い、配向度関数を算出するなかれの中の補助ソフトウェアである。分離の際、バックグラウンド削除も考え、G a u s s 関数に想定しています。

配向度関数計算で難しいのは、バックグラウンドの算出であるが、本ソフトウェアでは、自動計算を行うことで、再現性のある補正を行っている。

データ処理の流れ

Z i g z a g F i b e r ソフトウェア

入力データ

β -I データ (A S C)

極点測定データ (A S C)

出力

A S C

T X T

処理内容

ビームストップ影の補正

平滑化

バックグラウンド削除

F i b e r P e a k S e p a r a t e ソフトウェア

入力データ

β -I (A S C)

出力データ

A S C

T X T

処理内容

ピーク分離

F i b e r S i m p l e O r i e n t a t i o n ソフトウェア

入力データ

T X T

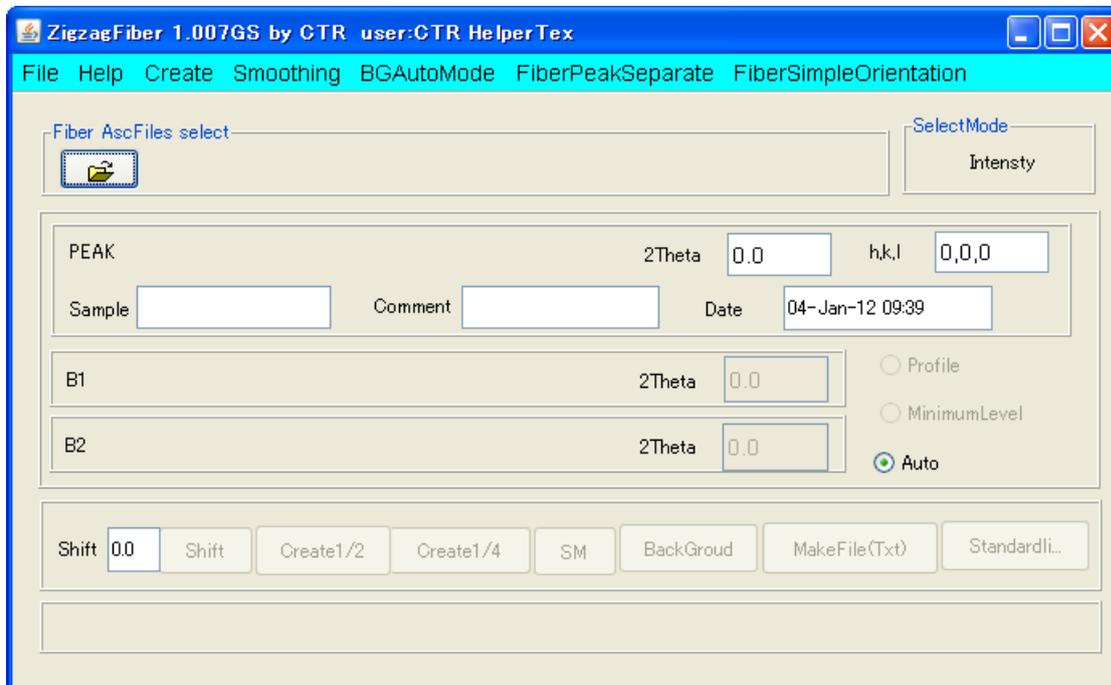
処理内容

配向度関数の算出

ソフトウェアの使い方

C:\CTR\bin\ZigzagFiber.jar を起動

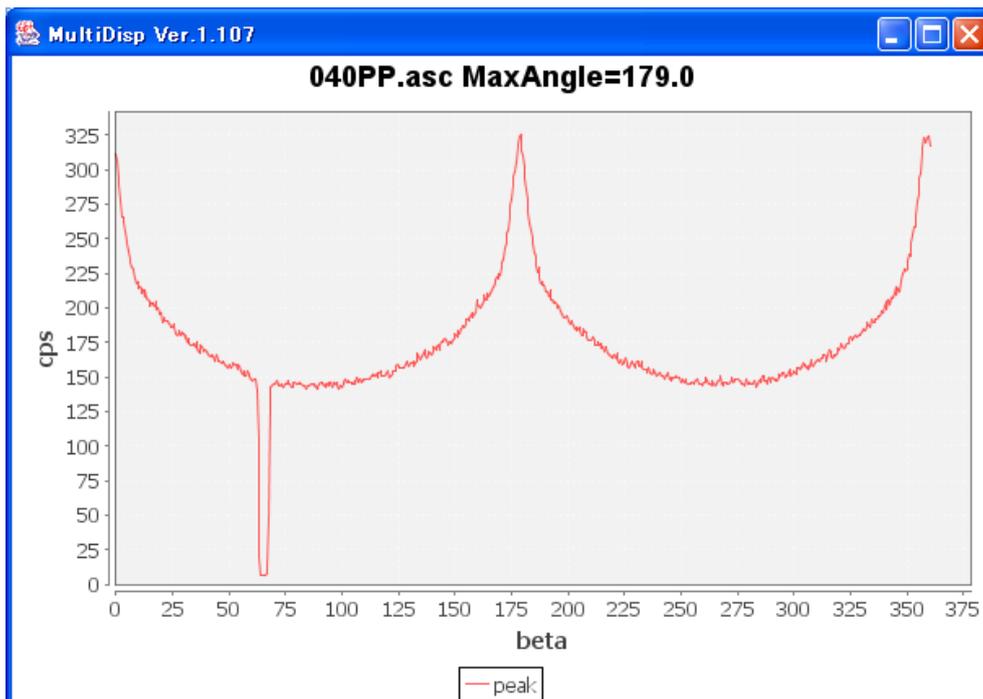
バックグラウンド自動処理を説明



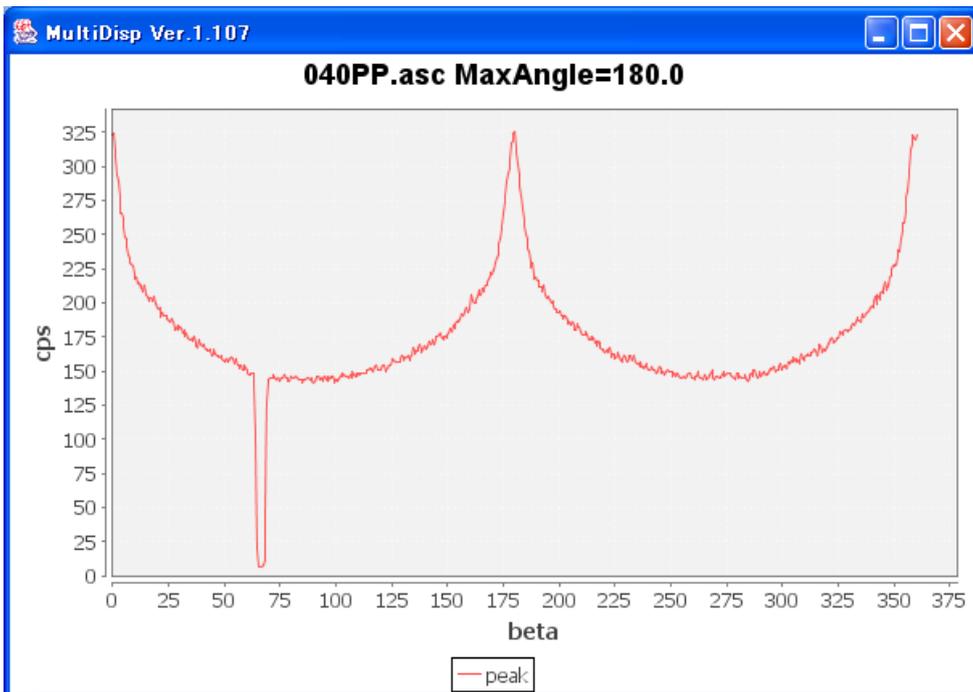
入力データの選択 (A s c ファイル)



選択したプロファイル



最大強度位置が 179 度と示されている。S h i f t が必要である。



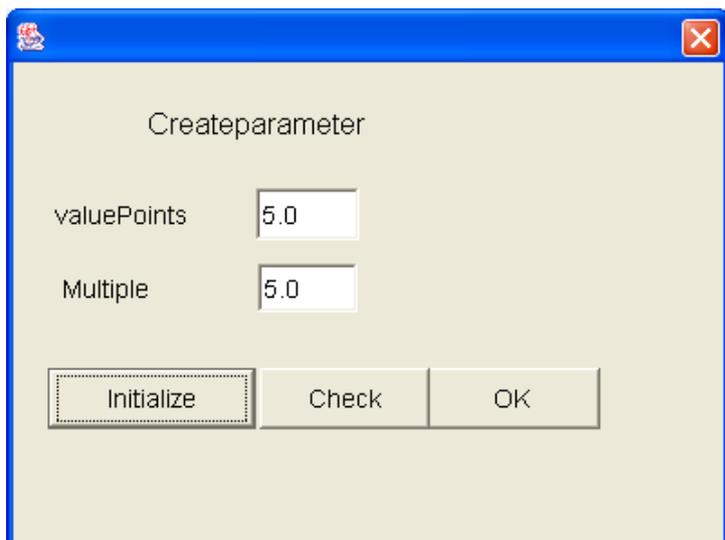
合わせて、ビームストップの影が、0 → 90 の間になるようにシフトする。



で対称操作で、ビームストップの影を補間する。



パラメータは、Parameter



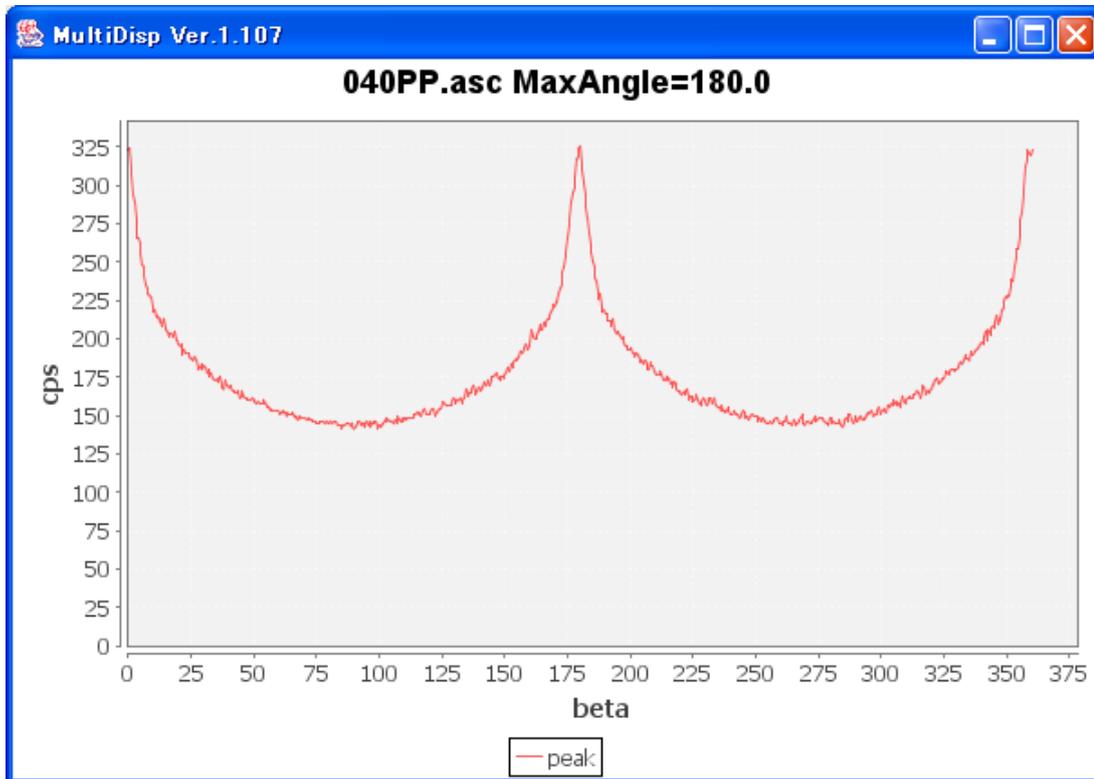
Valuepoints と Multiple は、ビームストップの影を検出するパラメータである。

全プロファイルの平均値 AVE を ValuePoints で割った値 level で、プロファイルの交点を 2 か所検出しその幅 W が計算出来る。この幅の Multiple 分の幅を create する。

1/2 は 2 回対称で、1/4 は 5 回対称操作をおこなう。

Check でパラメータの check が行われ、
OK でパラメータが保存される。

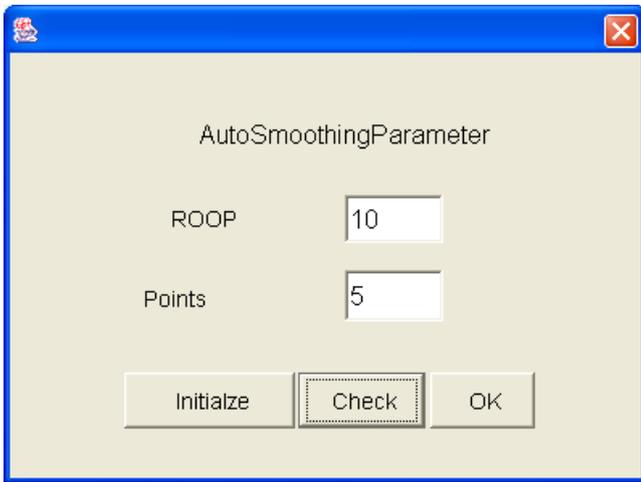
Create1/4 で作成



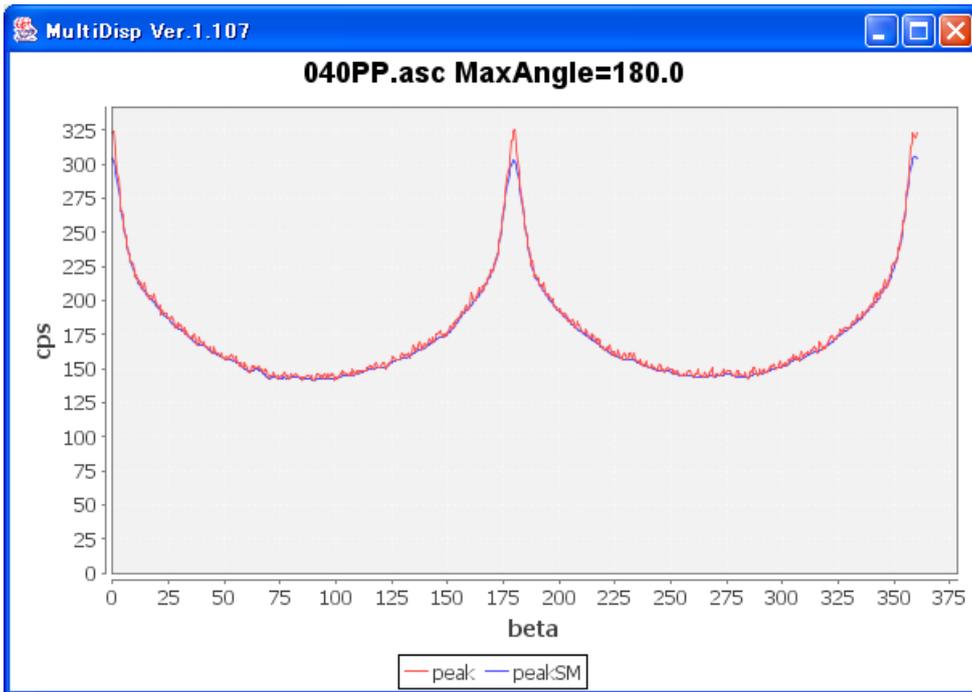
で平滑化のパラメータ変更が行われる。

The image shows a dialog box titled "AutoSmoothingParameter". It has two input fields: "ROOP" with the value "1" and "Points" with the value "3". At the bottom, there are three buttons: "Initialize", "Check", and "OK".

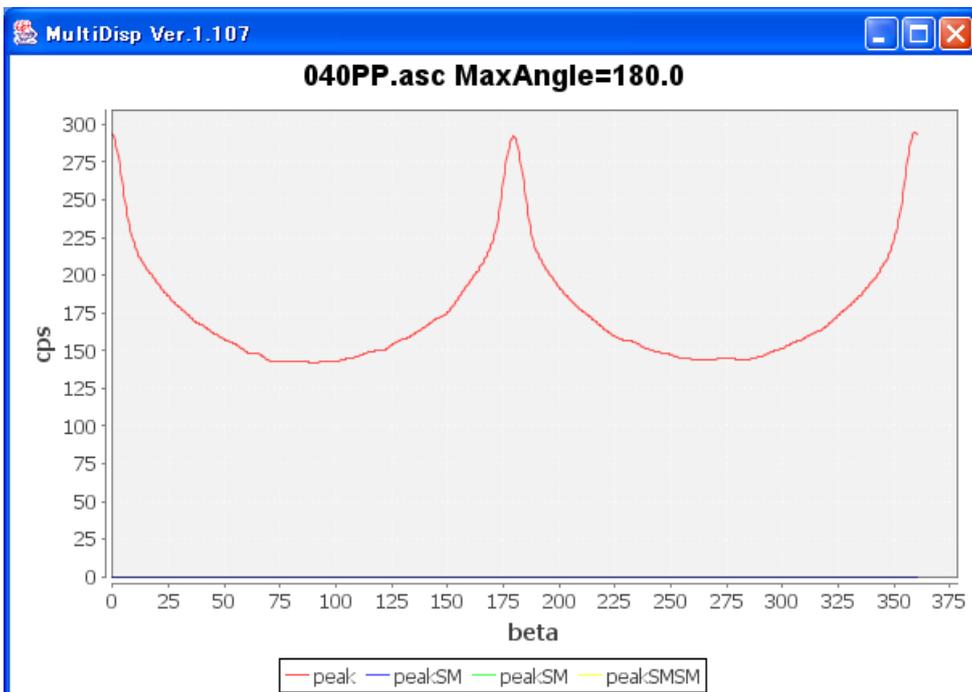
Points の移動平均を、ROOP 回繰り返します。上記はデータ点数が少ない場合、多い場合は

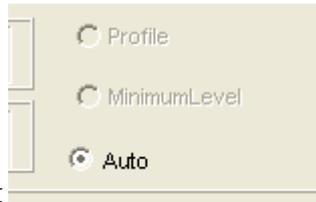


Check で確認が行える。確認だけで実際の平滑化は行われていない。OK で画面を閉じ、

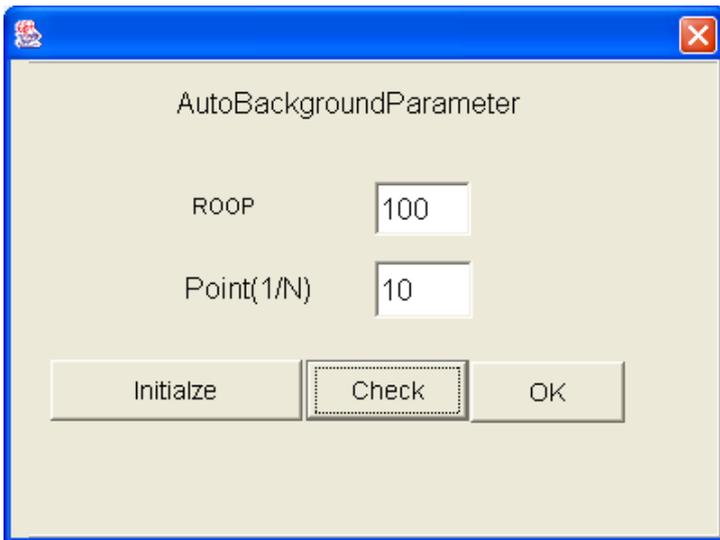


でデータの平滑化を行う。

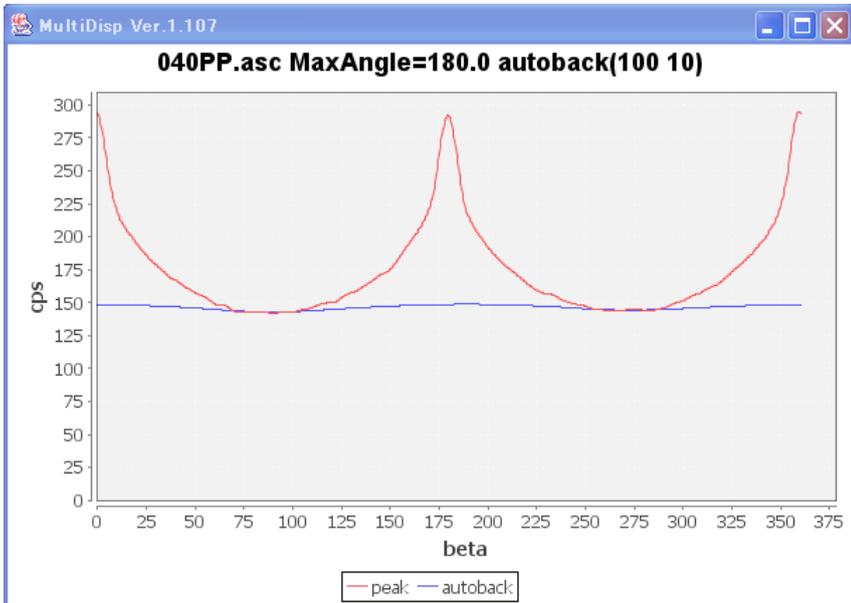


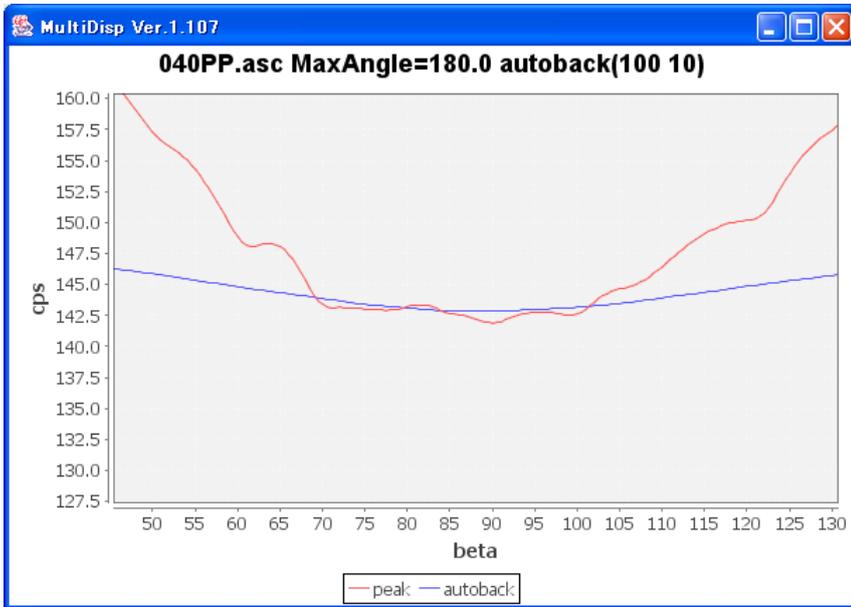


自動バックグラウンド処理は Profile MinimumLevel Auto
で行いパラメータは

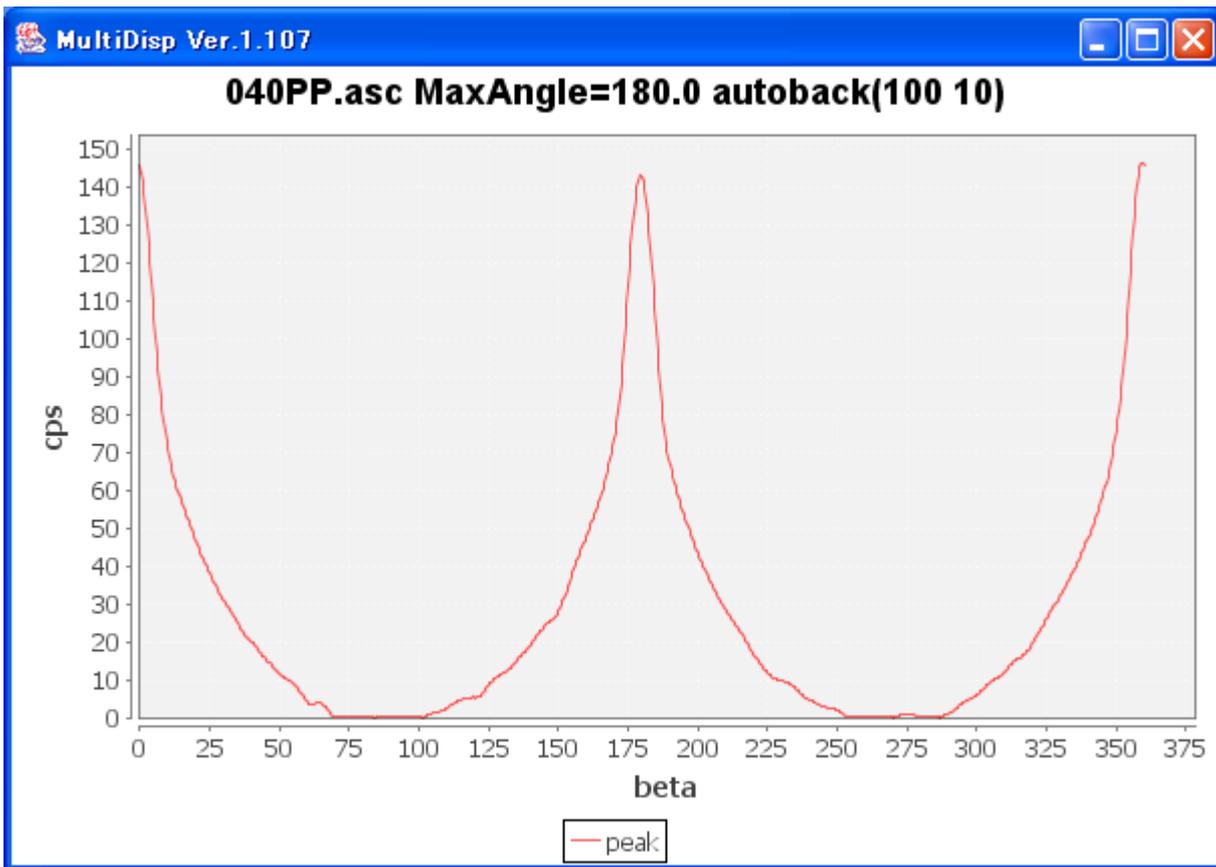


Points は移動平均のデータ点数を決めるパラメータで、全データ点数 n 、入力数 N の場合移動平均点数は、 n/N 、移動平均プロフィールより求め、ROOP 回繰り返される。





BackGroud で



バックグラウンドを削除したデータが得られる。



得られたデータは、でASC, TXTデータでファイルが作成される。

連続処理

File Help Create Smoothing BGAutoMode FiberPeakSeparate FiberSimpleOrientation

ピーク分離を行う場合、FiberPeakSeparate (入力データは Asc)

配向度関数を計算する場合、FiberSimpleOrientation(入力データは TXT)

Autoでバックグラウンド除去した場合の配向度関数

