

極点測定支援ソフトウェア

C r e a t e P r o f i l e

Ver.1.06

2022年01月19日



HelperTex Office

操作上、不都合がありましたら odftex@yahoo.co.jp へ連絡下さい。修正版は mail で送付致します。

Ver. 1.001 2010-09-03 波長変更で `txtlist` にも反映
Ver. 1.002 2010-10-06 計算パラメータを保存し、次回起動時の条件に反映
Ver. 1.003 2010-11-29 Asc ファイル作成を追加
Ver. 1.004 2011-04-06 $k\beta$ に係数が掛けられていない修正
Ver.1.02X 2012/06/11 新しい管理に移行
Ver.1.03 2020/09/19 ASC ファイルに Date 追加
Ver.1.04 2020/09/19 random なノイズ追加
Ver. 1.06 2022/01/19 Flatrandomadd 追加

概要

複数の物質が混合している場合、プロファイルの重なり具合が知りたくなる。
元々、無配向でないとしたら、 $2\theta/\theta$ プロファイルでは重なり具合は分からない。
本ソフトウェアは計算により、プロファイルの重なり具合を確認するツールである。
入力ファイルは、MaterialDataソフトウェアで処理出来るフォーマットである。
作成は、EditorかMakeMyICDDソフトウェアによる。

計算

プロファイル計算はGauss関数とLorentz関数を基本とし

$$F(2\theta) = r * G(2\theta) + (1 - r) * L(2\theta)$$

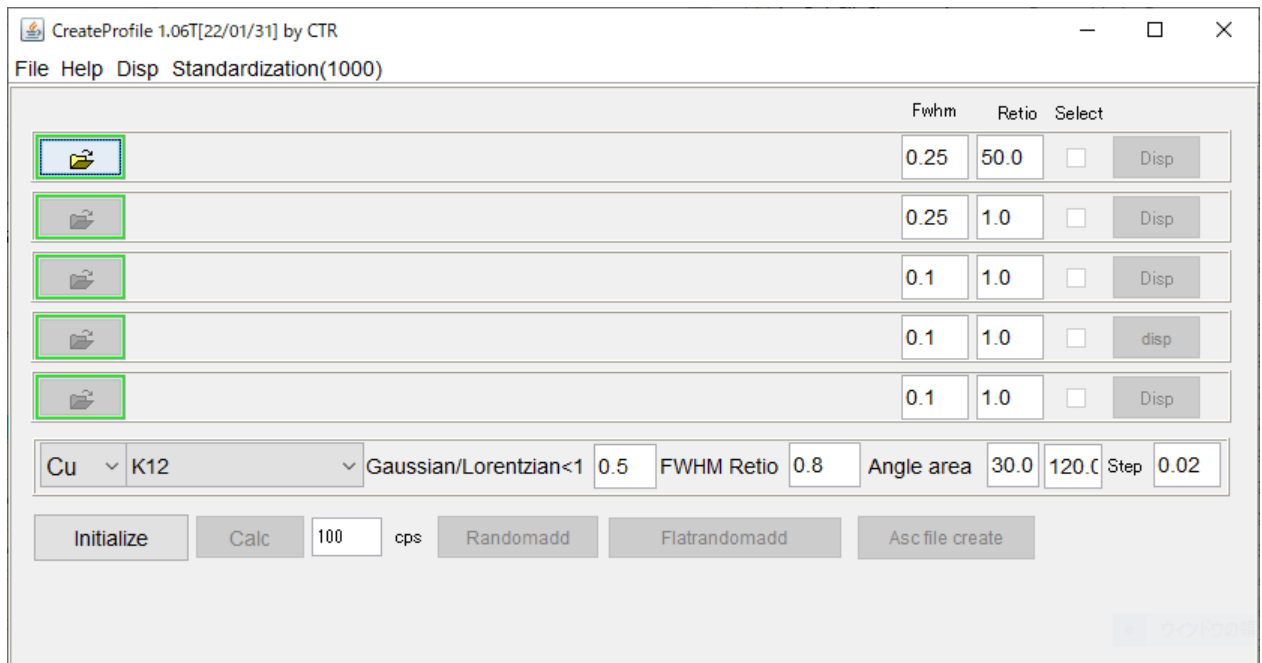
$F(2\theta)$ では、 k_1 、 k_2 、 k_a 、 k_{beta} をそれぞれ計算し加算している。

半価幅の扱いは、 $(1 + \sin(\theta))$ を係数としている。

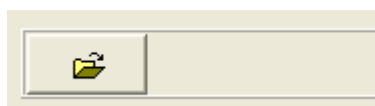
半価幅、プロファイル最大強度は、物質毎に指定出来る。

使用方法

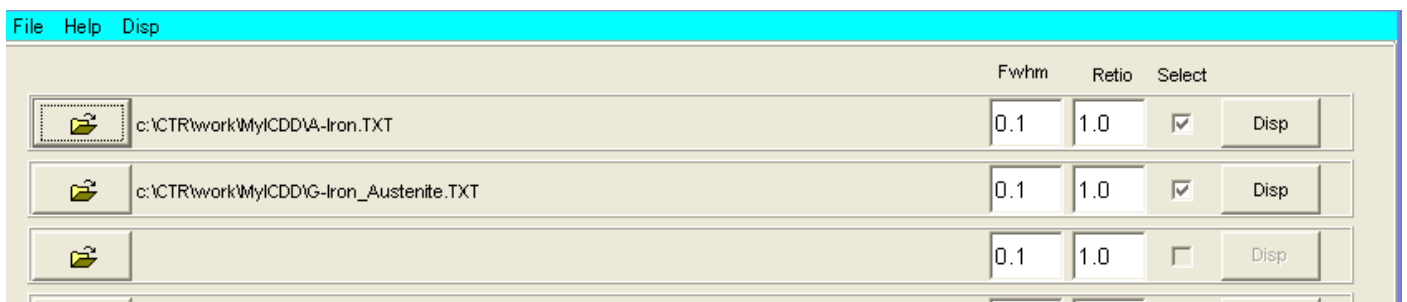
C:\CTR\bin\CreateProfile.jar で起動



入力ファイルの選択



同時に複数のファイルが選択出来る (Max 5 ファイル)



Fwhm	Retio	Select
0.1	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
Disp		

Dispで選択したファイルの確認が出来る。

Ver1.001で波長変更に対応した。

Fwhm	Retio	Select
0.1	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>

Fwhm, Retio, Selectの指定が可能

各々、半価幅、Profileの強度比、profile表示選択である。

Cu	K12
----	-----

は波長の選択と線種の選択

Gaussian/Lorentzian<1	0.5
-----------------------	-----

はGauss関数とLorentz関数の比率指定

FWHM Retio	0.8
------------	-----

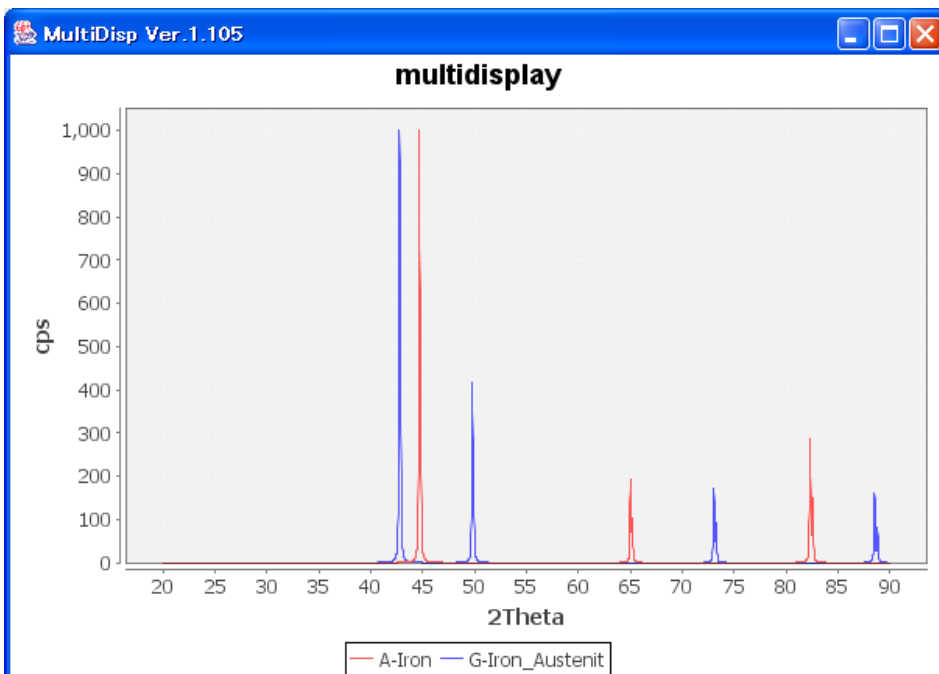
は各データの半価幅の比率を一律に変更出来る。

Angle area	5	90	Step	0.02
------------	---	----	------	------

は表示する範囲とステップ幅

Calc

でプロファイル表示



拡大縮小、印刷はマウス操作で行います。

条件の初期化

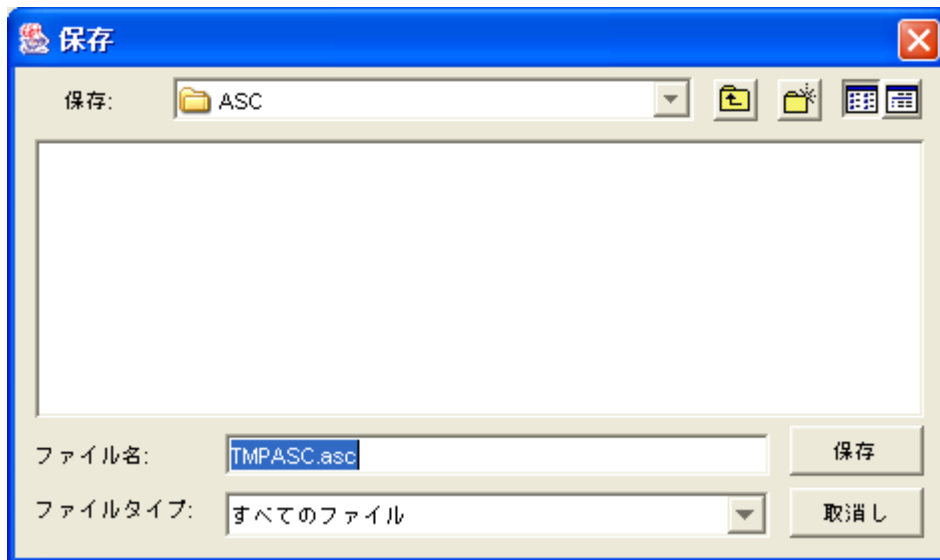
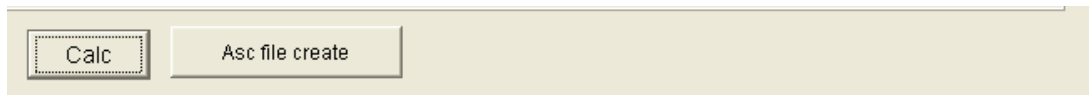


C a l cを行うと、条件が登録され、次回起動時に反映される。

I n i t i a l i z eで表示されている条件を最初の条件に変更する。

A s cファイルを作成

C a l c処理後、結果のA s cファイル作成が可能



常にTMPASC. a s cが表示されるので、ディレクトリ、ファイル名を変更して保存してください。