

配向状態の回折プロファイルをシミュレーションする

O r i e n t a t i o n P r o f i l e ソフトウェア

Ver.1.01

2017年12月01日

HelperTex Office

Ver1.01 2017/12/01 ピーク本数を5本から7本に変更

概要

高分子材料など、回折線に近接ピークが多い場合、回折線の畳み込みが発生する
更に、ピーク半価幅が広がりピークがブロード化しピーク位置が判別できないプロファイルが
測定される。この状態をシュミレーションする。

入力データ

Materialデータ

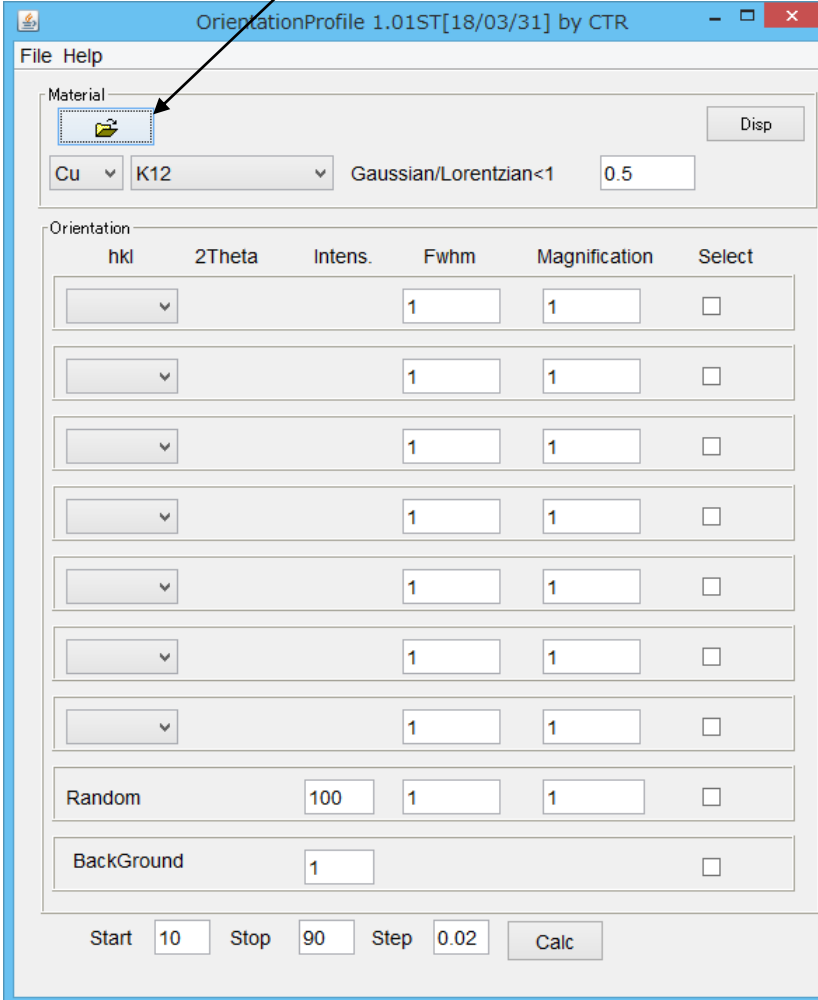
ソフトウェアの起動

C:\¥CTR¥bin¥OrientationProfile.jar の直接起動

ToolKit->DataBaseTools->OrientationProfile

ソフトウェア

材料の選択

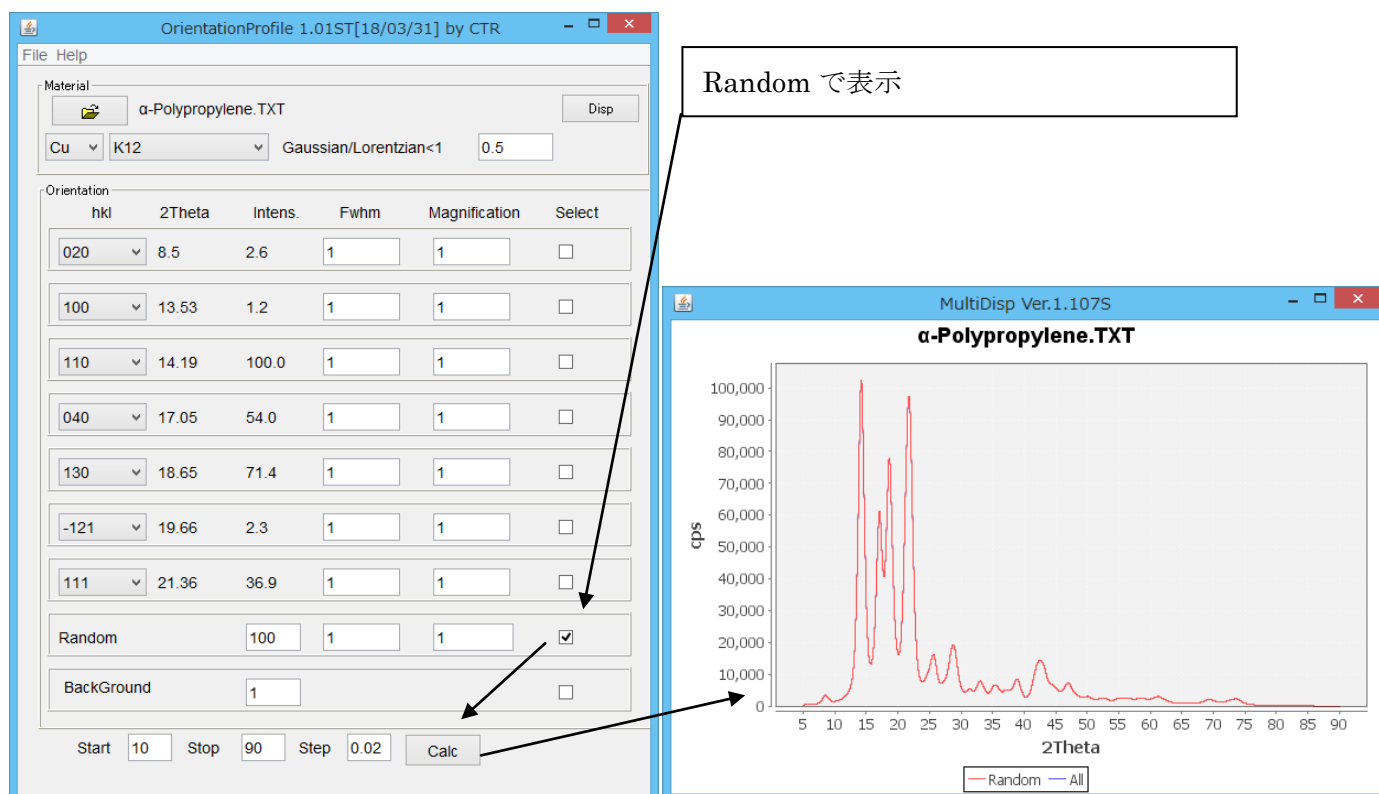


The screenshot shows the 'OrientationProfile 1.01ST[18/03/31] by CTR' application window. The 'Material' section is highlighted with a red box and an arrow pointing to it from the text '材料の選択'. The 'Material' section includes a folder icon, a 'Disp' button, and dropdown menus for 'Cu' and 'K12'. Below this, there are input fields for 'Gaussian/Lorentzian<1' (set to 0.5) and a 'Select' checkbox. The 'Orientation' section contains a table with columns for 'hkl', '2Theta', 'Intens.', 'Fwhm', 'Magnification', and 'Select'. The table has seven rows with 'hkl' dropdowns and 'Intens.', 'Fwhm', and 'Magnification' input fields. Below the table are 'Random' and 'BackGround' sections with input fields and checkboxes. At the bottom, there are 'Start', 'Stop', 'Step', and 'Calc' input fields and buttons.

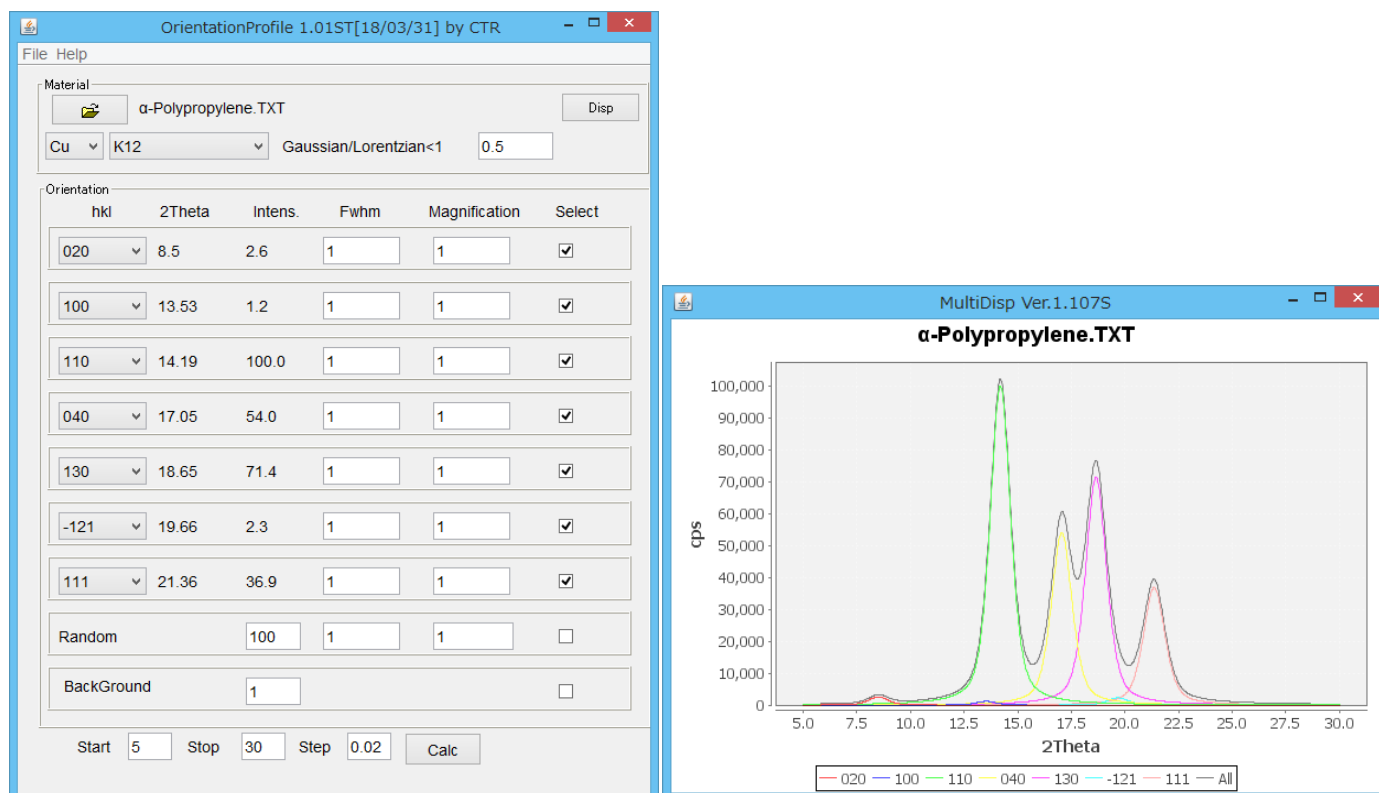
hkl	2Theta	Intens.	Fwhm	Magnification	Select
		1	1	1	<input type="checkbox"/>
		1	1	1	<input type="checkbox"/>
		1	1	1	<input type="checkbox"/>
		1	1	1	<input type="checkbox"/>
		1	1	1	<input type="checkbox"/>
		1	1	1	<input type="checkbox"/>
Random		100	1	1	<input type="checkbox"/>
BackGround		1			<input type="checkbox"/>

Start: 10 Stop: 90 Step: 0.02 Calc

α-Polypropylene を選択



反射単独ピークと加算ピークの表示



個々のプロファイルと加算されたプロファイルが表示される。

測定されるプロファイルは加算されたプロファイルです。

このプロファイルから半価幅 (fwhm) に倍率 (Magnification) の変更を加えて測定プロファイルのシュミレーションを行う。

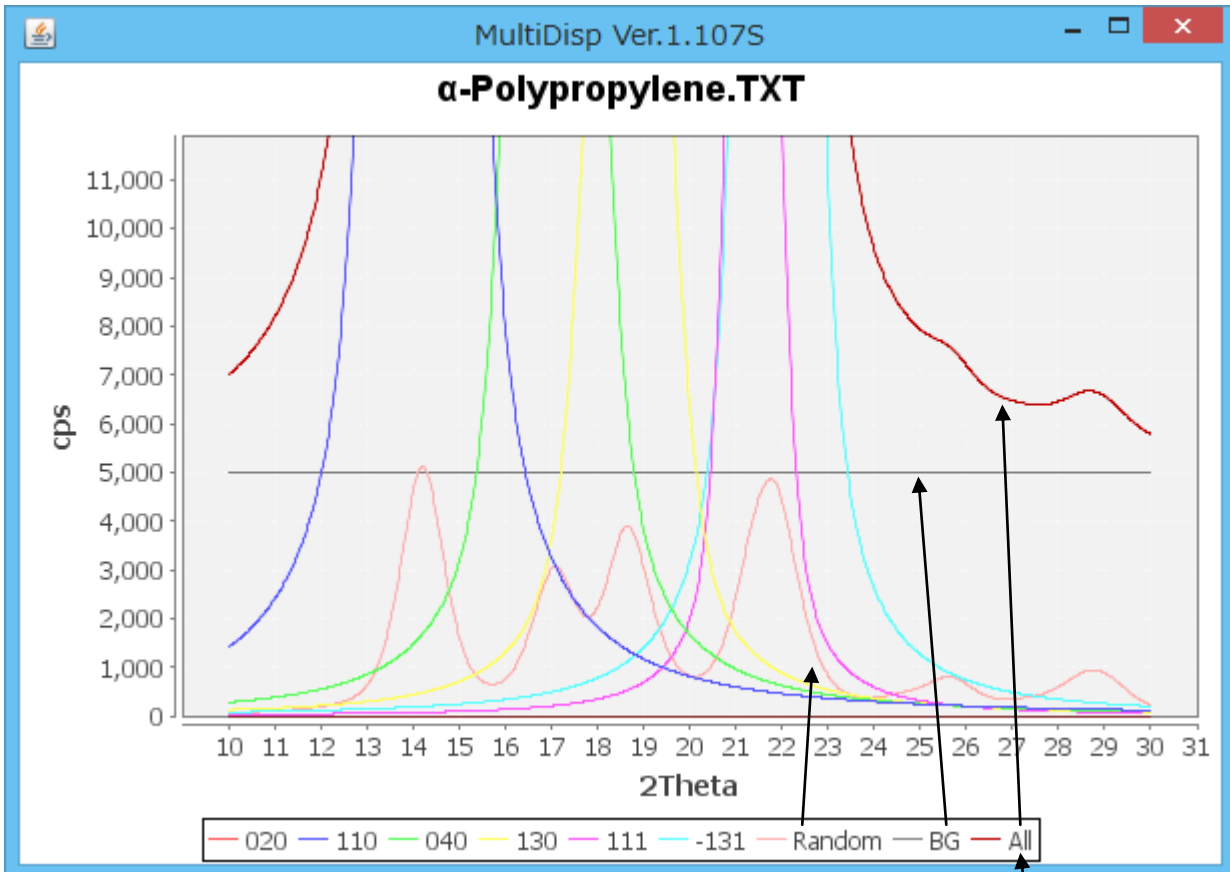
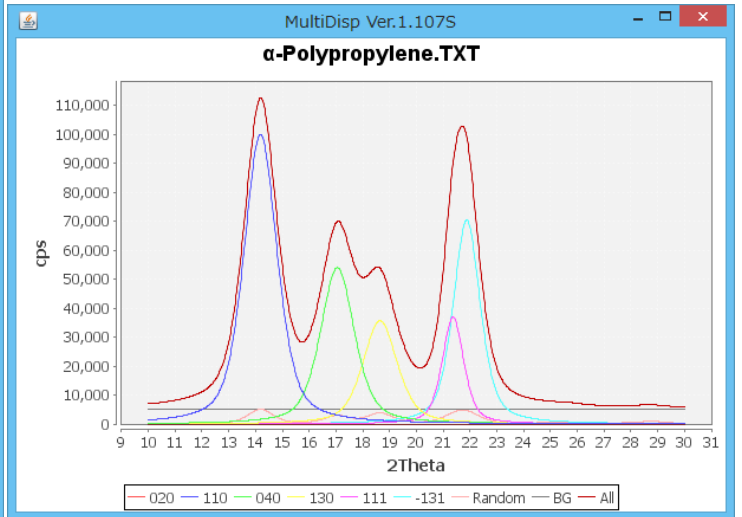
OrientationProfile 1.01ST[18/03/31] by CTR

Material: Disp

Cu K12 Gaussian/Lorentzian<1 0.5

hkl	2Theta	Intens.	Fwhm	Magnification	Select
020	8.5	2.6	1	1	<input checked="" type="checkbox"/>
110	14.18...	100.0	1.3	1	<input checked="" type="checkbox"/>
040	17.05...	54.0	1.3	1	<input checked="" type="checkbox"/>
130	18.64...	71.4	1.3	0.5	<input checked="" type="checkbox"/>
111	21.36...	36.9	0.8	1	<input checked="" type="checkbox"/>
-131	21.87...	70.4	1	1	<input checked="" type="checkbox"/>
111	21.36	36.9	1	1	<input type="checkbox"/>
Random	5	1	1		<input checked="" type="checkbox"/>
BackGround	5				<input checked="" type="checkbox"/>

Start 10 Stop 30 Step 0.02



加算プロフィールです。