JADE の使用例(3) プロファイルフィッティング2 詳細編

手動でプロファイルフィッティングを行う場合

●プロファイル関数の選択

プロファイルフィッティングを行うときに、プロファイル関数を以下の候補の中から選択 できます。一般的に、尖ったピークトップと長い裾野を持つピークには Pearson-VII が適し ています。一方、より丸みのあるトップを持つピークには、擬 Voigt(Pseudo-Voigt)が適し ています。

- ・擬 Voigt (Pseudo-Voigt)
- Pearson-VII
- ・FCI モデル (FCI-Model)

·分割 Pearson VII (Split-Pearson)



●パラメータの制約、固定、共有

プロファイルフィッティングのツールバーの「メニュー」ボタンから、フィッティングパラ メータの数(自由度)を減らすことができます。例えば、同じセグメント内でプロファイルを 制約をかけたり、いくつかのパラメータ(例えば非対称性のパラメータ)を共有することによ り行えます。

具体的には、下図のように統一メニューからパラメータを共有する設定を行ったり、「プロファイルの制限」サブメニューでそれらのパラメータ範囲を制限することができます。

	2	直線 BG ▼	擬 Voigt 🝷	у́⊒а-	- 🕂 初期化 🕨 フィッテ	イング	💵 実行 😂 RIR 💆 IPC	2 🛛	2 結	晶子	×	et 🚉 🖇	ia 🖪 🖉)-I <u>-</u>
	スキャン	<mark>(1) </mark> 最近の	177111 🗳		Kα2有り		分率(s) = 0.5	<u></u> 1	η <mark>(</mark> 6	i) (その他	: Δ2θ±0.	20° 3 🎸	2/1
#		回折角 <mark>(°)</mark>			Ka1/a2 比 Ka2/a1 梔		非対称性 = 0.0		1)	面積	(α1)%	非対称1	形状因子	
1	54.0	076 (0.002)	1.6945 (0.	_	True The	-	角度 = ±0.5°	J.	1)	66.3 (2.5)%	0.071	1.000v	0.
2	54.3	336 (0.001)	1.6870 (0.	1	非対称を統一		FWHM = 3.0°		3) 1	100.0 (2.5)%	0.071	0.527v	0
3	54.4	420 (0.245)	1.6846 (0.		形状因子を統一		非动称性 = +0.95	Ē.()) 3	37.1 (1	7.7)%	0.071	0.541v	1.
4	55.0	085 (0.023)	1.6658 (0.		FWHM を統一			2	2)	10.1 (4.5)%	0.071	0.473v	0.
5	56.	642 (0.002)	1.6237 (0.	#	プロファイルの制服 ℕ ▶		非対称を回定	23	3)	38.4 (1.3)%	0.071	1.000v	0.
6	57.5	585 (0.005)	1.5993 (0.	 # b			現在のピーク	.7	7)	10.8 (0.8)%	0.071	0.747v	0.
				1		-	ラインマーカー							
◆現	●現在のウィントウサイス?{Width=1344 📐 火ニュ				火ューを表示 →	١	∿ルフ°トヒ°ック		()	Å2. 🗖		<5.632°>	δ=0.02°	=(

パラメータを固定する場合は、「プロファイル」タブのリストの中で1つまたは複数の対象 となるプロファイルを選択、右クリックし、「変数を固定」サブメニューから設定できます。

	😰 🛛 直線 BG 🔻	擬 Voigt ▼ ソニュ- ▼ ᠕ 初	期化 🕨 フィッティング 💷 🗄	見行 🔇	🕒 RIR 🔽 IPC 🖄 結晶子	× =•
•	スキャン <mark>(1)</mark> 最近の	17ァイル 🗳 相リスト (0) 🛅	リストを11℃ リストを1255	~		その他に
#	回折角(°)	d(Å) 🛓 🔜			高さ 🕺	ູ້ 1)% ູ
1	54.076 (0.002)	1.6945 (0.0001) 5	기지만전니(2月) ~~		FWHM H	5)%
2	54.336 (0.001)	1.6870 (0.0001) 54	-C 77 XF	-	Lorentz因子	5)%
3	54.420 (固定)	1.6846 (固定) 54 🛼	それを除く	~	非対称性	7)%
4	55.085 (0.023)	1.6658 (0.0013) 5	プロファイルを除去		非晶質ピーク	5)%
5	56.642 (0.002)	1.6237 (0.0001) 5	変数を固定	Int		_3)%
6	57.585 (0.005)	1.5993 (0.0002) 51			平坦な」東部をスキッアー	8)%
×447#		(775t		_	FWHM を指定 …	2
準価	かできました …		列をリスト ▶		ピーク位置を指定	< <:

●飽和ピークへの対処

イメージングプレートのようなデータソースから飽和ピークのフィッティングを行う場合、 「面積%」より後ろの列で右クリックし、「平坦な頂部をスキップ…」を選びます。ピーク トップの範囲を入力するダイアログが表示され、飽和ピークに対処できます。

