



Johann Wolfgang Goethe-Universität - Institut für Geowissenschaften - Fachinheit Geologie



### Peak Fit mit MacDiff

MacDiff fittet über einen Einzelpeak oder eine Gruppe von bis zu sieben Reflexen, d.h. legt auf jeden hiermit zu berechnenden Peak ein Funktion und berechnet deren Funktionswerte so lange, bis sie die Peakform bzw. die gemeinsame Umhüllende (Envelope) mehrerer Peaks am besten abbildet. Mögliche Profil-Funktionen sind Gauss, Lorentz (normal, intermed, modified), Pearson VII und Pseudo Voigt (wahlweise für jeden Peak gesondert). Die Funktion kann symmetrisch oder asymmetrisch berechnet werden. Die Einstellungen werden im neuen "Peak Fit Settings"-Dialog vorgenommen:

**Peak Fit Settings**

---

Peak Refinement settings

**Least Residuum Reduction**  \* Only used for Pearson VII (m factor) or Pseudo Voigt (Gauss/Lor.)

**Largest Loop No. of Refinement**

---

Include/Exclude Profile Parameter

Profile Function ☐ Split Profile (allow Asymmetry)

**Peak** ☒ Bragg° ☒ Intensity ☒ FWHM ☒ m factor \* ☒ Global Function:  ☒ Split All

<input checked="" type="radio"/> 1	<input checked="" type="checkbox"/> 52.3607	<input checked="" type="checkbox"/> 374.325	<input checked="" type="checkbox"/> 0.2978 <input checked="" type="checkbox"/> 0.3235	<input checked="" type="checkbox"/> 2.7556 <input checked="" type="checkbox"/> 1.5337	<input type="text" value="Split Pearson VII"/>	<input checked="" type="radio"/>
<input checked="" type="radio"/> 2	<input checked="" type="checkbox"/> 53.3013	<input checked="" type="checkbox"/> 199.202	<input checked="" type="checkbox"/> 0.5002 <input checked="" type="checkbox"/> 0.3137	<input checked="" type="checkbox"/> 1.4774 <input checked="" type="checkbox"/> 10.7724	<input type="text" value="Split Pearson VII"/>	<input checked="" type="radio"/>
<input checked="" type="radio"/> 3	<input checked="" type="checkbox"/> 53.7597	<input checked="" type="checkbox"/> 250.221	<input checked="" type="checkbox"/> 0.4145 <input checked="" type="checkbox"/> 0.29	<input checked="" type="checkbox"/> 1.1737 <input checked="" type="checkbox"/> 0.9392	<input type="text" value="Split Pearson VII"/>	<input checked="" type="radio"/>
<input checked="" type="radio"/> 4	<input checked="" type="checkbox"/> 54.1594	<input checked="" type="checkbox"/> 30.1337	<input checked="" type="checkbox"/> 0.4734 <input checked="" type="checkbox"/> 0.2539	<input checked="" type="checkbox"/> 25.2347 <input checked="" type="checkbox"/> 25.6034	<input type="text" value="Split Pearson VII"/>	<input checked="" type="radio"/>
<input checked="" type="radio"/> 5	<input checked="" type="checkbox"/> 54.6315	<input checked="" type="checkbox"/> 21.666	<input checked="" type="checkbox"/> 0.5586 <input checked="" type="checkbox"/> 0.3272	<input checked="" type="checkbox"/> 20.5819 <input checked="" type="checkbox"/> 20.5819	<input type="text" value="Split Pearson VII"/>	<input checked="" type="radio"/>
<input type="radio"/> 6	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="Split Pearson VII"/>	<input checked="" type="radio"/>
<input type="radio"/> 7	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="Split Pearson VII"/>	<input checked="" type="radio"/>

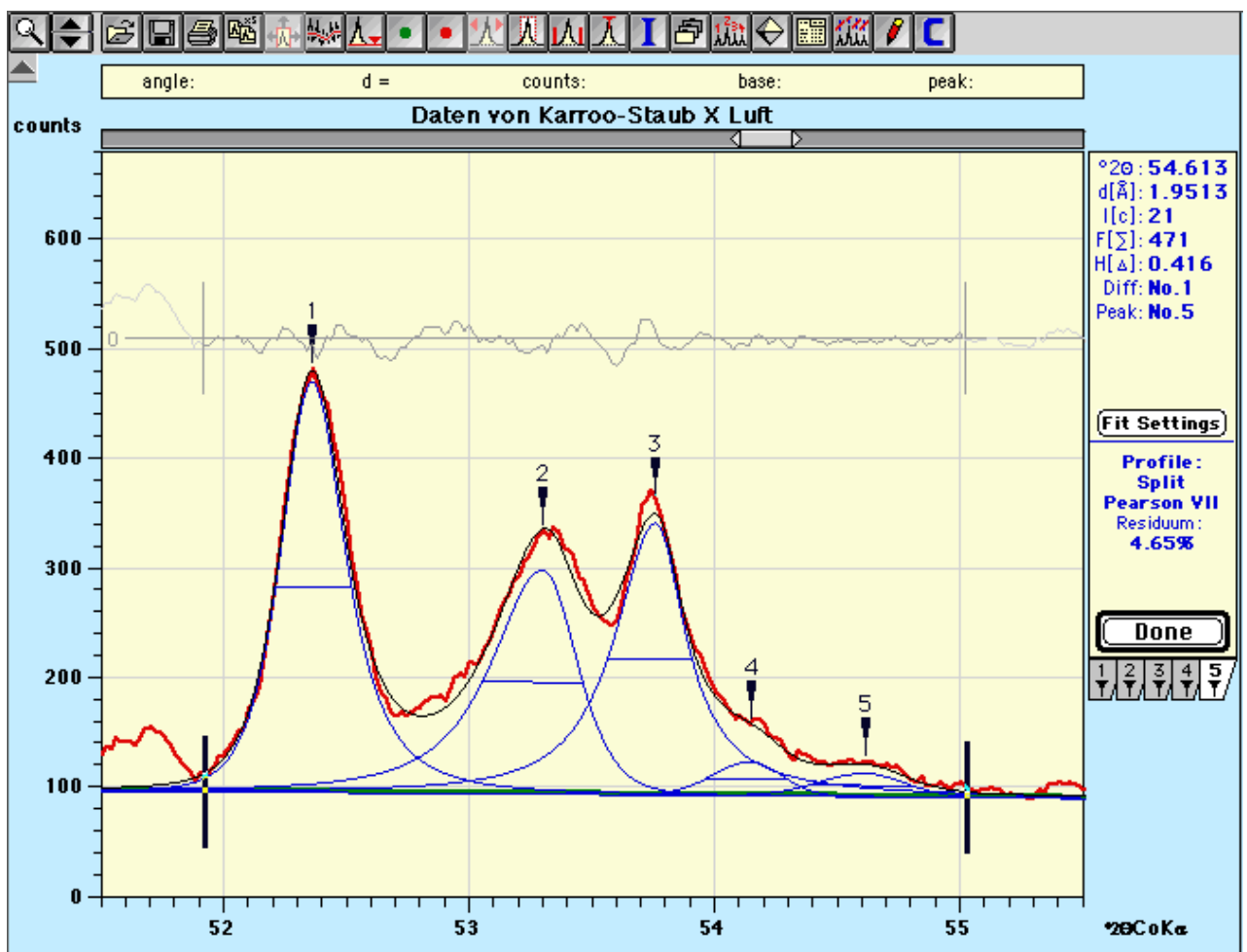
☒ Include/Exclude All ☐ Lock Bragg Angles permanently

☒ User-defined Boundaries ☒ Draw Multipeak Envelope  
☐ Faster (less accurate) ☒ Draw Residuum  
☒ Sort peak Intensities ☒ Draw Interim Results  
☒ Play Sound if Finished ☒ all in one

Line size:

**Einzelpeak Fit:** Gehe zum Preference Menü und stelle die "Fitting Profile Function"-Check Box an. Als Alternative kann man beim Doppelklick auf einen Peak auch F-Taste auf der Tastatur betätigen. Gehe zuerst zum "Peak Fit Settings"-Dialog, um die Profilfunktion, die Asymmetrie oder Symmetrie, die erforderliche Anzahl an Verfeinerungen (refinements loops) und die Genauigkeit der Verfeinerung (least residuum reduction, in älteren betas: variation) einzustellen. Weiterhin kann man u.a. einstellen, ob die Peakabgrenzungen fest bleiben sollen oder nicht, und ob man einen schnelleren aber weniger genauen Kalkulationsmodus verwenden möchte (Faster (less accurate)). Um das Fit-Ergebnis sauber betrachten zu können, sollte das Diffraktogramm gezoomt werden (Als Alternative steht auch die "Zoom Peak Area"-Funktion zur Verfügung über Icon oder über Menü ansteuerbar). Doppelklicke nun den Peak zur Peakanalyse. Nach einer gewissen Rechenzeit (abhängig von den Einstellungen sowie vom Mac-Modell) zeichnet MacDiff die errechnete Funktion direkt in das Diffraktogramm. Diese verschwindet nach dem nächsten Klick auf "Done". Die Profilit-Daten werden auf die gleiche Art und Weise anstelle der normalen Peakdaten rechts oben in einem Kasten wiedergegeben wie bei den Standard-Peakberechnungen. Die kompletten Funktionsparameter sind im "Peak Info"-Fenster angezeigt, gehe hier auf den "Fit Data"-Reiter. Auch die Report-Liste enthält nun die Peakdaten aus der Funktion (d-Wert, Intensität, Fläche, Halbhöhenbreite). **Beachte: Alle Daten aus gefitteten Funktionen werden in blauer Farbe wiedergegeben!**

**Multipeak Fit:** Gehe, wenn nötig, zu den "Peak Fit Settings" und stelle die gewünschten Fit-Preferences ein. Zoome das Diffraktogramm, dass alle zu fittenden Peaks das Fenster füllen. Halte die Hochstelltaste (Shifttaste) gedrückt und klicke alle gewünschten Linien an. Im Cursor ist die aktuelle Peaknummer von 1 bis 7 angezeigt. Lasse die Shifttaste los. Klicke dann auf den "Fit now"-Button, um die Peakanalyse zu starten. Warte und beobachte die Anzeige rechts oben, ob und wie die Verfeinerung arbeitet (Hierin wird das Residuum angezeigt, welches allmählich immer kleiner werden sollte). Nach Abschluss der Rechnung zeichnet MacDiff alle Funktionen zusammen mit der umhüllenden Gesamtkurve (envelope) und der Residuumkurve direkt in das Diffraktogramm (letztere beiden kann man im "Peak Fit Settings"-Dialog auch ausschalten). Rechts oben werden die Peakdaten des zuletzt ausgewählten Peaks angezeigt. Um die Daten der anderen Linien sichtbar zu machen, muß man die jeweiligen Reiternummern unterhalb des Anzeigefensters betätigen. Falls die Verfeinerung nur mit bestimmten Funktionsparametern fortgeführt werden soll, kann man im "Peak Fit Settings"-Dialog die jeweils gewünschten Funktionsparameter für jeden Peak zur weiteren Rechnung an- oder ausstellen. Die d-Werte, Intensitäten, Flächen und Halbhöhenbreiten aller Funktionen der ausgewählten Linien werden im Report gespeichert. Man öffne das Report-Fenster ("Show Report") um diese Daten (**in blau gehalten**) sichtbar zu machen. Falls man die kompletten Daten sehen möchte, gehe zum "Peak Info"-Fenster.



**MacDiff Report**

**Diff 1 : Daten von Karroo-Staub X Luft**

Phase	d(Å)	Int.	Area	FWHM
1 2.029 Å	2.029	359.4	6317.2	0.298
2 1.995 Å	1.995	194.8	4709.9	0.398
3 1.98 Å	1.98	239.7	5437.7	0.335
4 1.968 Å	1.968	37.3	856.8	0.428
5 1.95 Å	1.95	19.6	405.7	0.367

**MacDiff Peak Info**

**Daten von Karroo-Staub X Luft**

Diff. No. **1** Peak-No. **2**

Phase: **- (Fit)**

Bragg Angle ( $^{\circ}2\theta$ ): **53.306**  
 d-value (Å): **1.995**  
 Intensity (counts): **194.8**  
 Peak Area (counts): **4709.9**  
 FWHM ( $\Delta^{\circ}2\theta$ )/calibr.: **0.398/-**

Peak Data	Fit Data
<input checked="" type="checkbox"/> Profile function:	<b>splitted</b>
	<b>Pearson VII</b>
Residuum (%):	<b>4.95</b>
Chi-Square:	<b>52.0623</b>
Low Intensity factor:	<b>534.817</b>
Low FWHM ( $\Delta^{\circ}2\theta$ ):	<b>0.4957</b>
Low m factor:	<b>1.3213</b>
High Intensity factor:	<b>692.781</b>
High FWHM ( $\Delta^{\circ}2\theta$ ):	<b>0.2996</b>
High m factor:	<b>171.624</b>



[Webmaster](#), Fr. 19.02.2010 16:09