

NLH

NORGES
LANDBRUKSHØGSKOLE

WinXrdPro
Et program for tegning av røntgenkurver

av

Sverre Jørgensen og Per Jørgensen

Rapport nr.4/99 (76)

NORGES LANDBRUKSHØGSKOLE
Institutt for jord- og vannfag
Postboks 5028 1432 ÅS

ISSN 0805-7214

INSTITUTT FOR JORD- OG VANNFAG

Norges Landbrukshøgskole

Postboks 5028, 1432 Ås Telefon: (09) 94 75 00 - Agriuniv. Ås
Telefax: (09) 94 82 11 Rapportarkiv: (09) 98 82 04

ISSN 0805-7214

WinXrdPro.

Et program for tegning av røntgenkurver.

Av

Sverre Jørgensen og Per Jørgensen

Rapport nr : 4/1999 (76)

Begrenset distribusjon:

Fri

Dato: 20.05.99

Prosjektnummer:

Røntgenforsk

Faggruppe:

Jordfag (Mineralogi)

Geografisk område:

Generelt

Antall sider (inkl. bilag)

10

Oppdragsgivers ref.:

Oppdragsgiver: Institutt for jord- og vannfag, NLH

Sammendrag: WinXrdPro er et Windows-program for tegning av røntgendiffraktogram og utregning av refleksjonenes d-verdier. Flere kurver kan tegnes i samme diagram. Programmet vil forenkle arbeidet med bestemmelse av jordarters og sedimenters mineralogiske sammensetning.

4. Emneord, norske

1. Røntdiffraktometri

2. Mineralogi

3. Leirer

4. Jordarter

4. Emneord, engelske

1. X-ray diffraction

2. Mineralogy

3. Clays

4. Soils

Prosjektleder:



Per Jørgensen, professor

For administrasjonen:



Trond Børresen, professor

WinXrdPro

Et program for tegning av røntgenkurver

av

Sverre Jørgensen og Per Jørgensen

Innledning:

WinXrdPro er et Windows-program for opptegning av røntgendiffraktogram. Basisdata er en ASCII-fil med 2θ -verdier og intensiteter. Fordelen med programmet, sammenlignet med andre program, er at man kan bruke normale Windows kommandoer og laserprinter ved utskrift av kurvene.

Oppstartning:

Lag en katalog som heter RONTGEN. Legg programmet WinXrdPro inn i denne katalogen. Lag en underkatalog som heter Kurver og legg røntgenfilene her. Hvis du ikke har egne data kan du legge røntgenfilene E11.dat, E12.dat og E13.dat her.

Start Windows og gå til C:\RONTGEN\WinXrdPro.exe. Dobbelklikk på denne *.exe filen for å starte programmet og første meny kommer fram (Fig. 1.)

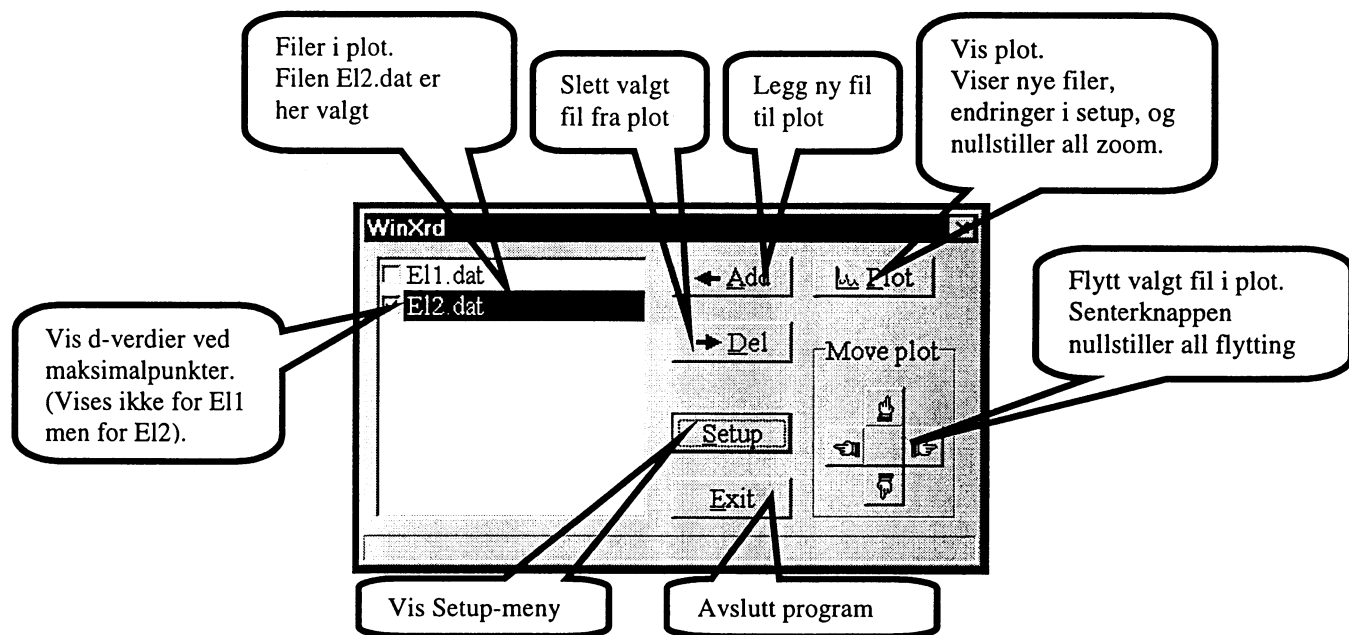


Fig.1. Startmeny for programmet WinXrdPro.

Klikk på **Add** og du får en standard Windows meny hvor du søker etter den ønskede røntgenfilen (i Kurver). Når du har funnet filen klikker du på den og deretter på **Open**. Filen legges inn i startmenyen, som vist for E11.dat i figur 1. I vinduet til venstre for filnavnet kan du markere om du ønsker at d-verdiene skal angis på toppene i diffraktogrammet.

Du fjerner en fil fra Startmenyen ved å klikke på den og deretter på **Del** kommandoen.

Klikk på **Plot**. Et røntgendiffraktogram, som vist i figur 2, kommer fram. Øverst til høyre er angitt prøvens navn (f.eks. E11.dat). Du har tre alternativer for hva du vil sende til printer.

- Plot only
- Text only
- Plot/Text

Velg **Plot only** ved å klikke på det runde vinduet, og klikk på **Print**. Du får fram en standard Windows meny hvor du klikker på **Properties**. Velg: • Liggende og trykk på OK. Trykk OK i neste meny og et diffraktogramm med d-verdier blir skrevet ut.

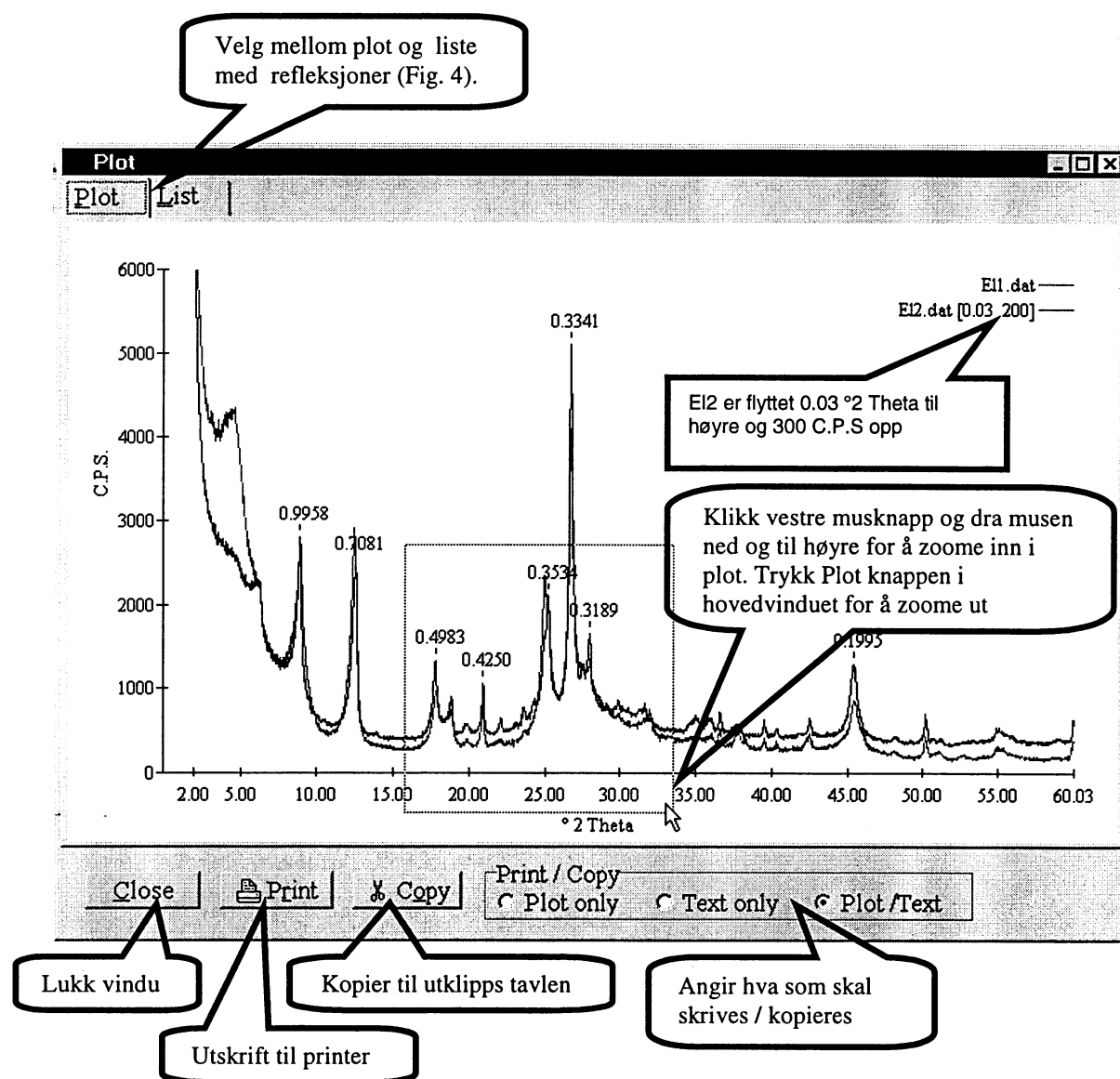


Fig. 2. Røntgendiffraktogram med kommandolinje nederst. I denne figuren er vist to diffraktogram, men toppenes d-verdier er bare vist for et diffraktogram.

Klikk på **Text only** og **Print**, og en liste som vist i figur 4 blir skrevet ut. Med **Plot/Text** og **Print** blir så vel diffraktogram som liste skrevet ut.

Hvis du bruker kommandoen **Copy**, blir enten **Plot** eller **Text** lagt på utklippstavlen og kan hentes inn i **Words** (Fig. 5).

Hvis du ønsker å endre noe på diffraktogrammet: Klikk på **Close**. Du kommer tilbake til Startmenyen hvor du klikker på **Setup**. Setupmenyen er vist i figur 3.

Nederst til høyre er vist bølglengden for røntgenstrålingen. I vårt tilfelle brukes $\text{CuK}\alpha$ -stråling, og bølglengden $\lambda = 0,154183$ nm. Røntgenrefleksjonenes d-verdi beregnes med Braggs lov. I datafilen er angitt verdiene for 2θ . Vi beregner $\theta = 2\theta/2$. d-verdiene beregnes med :

$$d = \frac{\lambda}{2 \cdot \sin(\theta)}$$

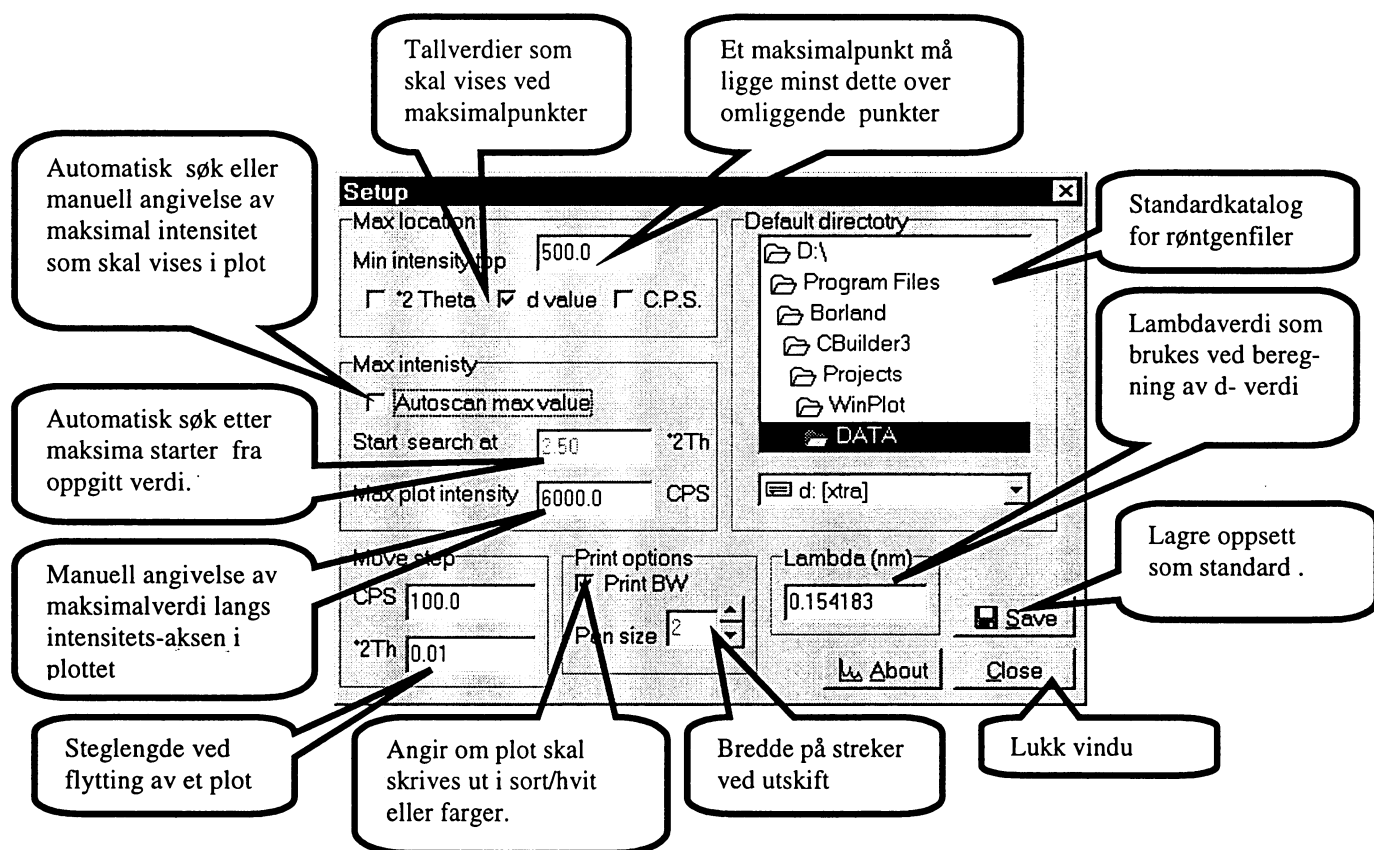


Fig. 3. Setup-meny

I dette eksempelet (Fig. 3) er det i **Max location** angitt at for topper med høyere intensitet enn 500 c.p.s. (counts per second) skal d-verdien markeres, slik som vist i figur 2. Hvis man ønsker å få med d-verdier for topper med lavere intensitet, så endres verdien i hvit rute. Velg en lavere verdi og klikk på **Plot**.

Med kommandoene under **Max intensity** kan du: La maskinen velge den maksimale verdi på intensitetsaksen, ved å markere i ruten: **Autoscan max value.** eller du kan angi den maksimalverdien du ønsker i **Max plot intensity xxxxxx CPS.** Da må autoscan feltet være blankt. Når du har foretatt ønskede endringer kan de lagres med **Save.**

Utskrifter.

I Setup menyen kan man under **Print options** velge mellom fargeutskrifter og sort/hvitt (BW). Under røntgendiffraktogrammet i figur 2 er det gitt tre alternativer:

- Plot only
- Text only
- Plot/Text

Det første valget gir bare røntgendiffraktogrammet, det neste gir bare en tabell med røntgenrefleksjonenes 2θ -verdier, d -verdier og intensiteter (Fig. 4), mens siste valget gir begge deler.

Plot og List

Den datafilen man får fra diffraktometeret inneholder en del informasjon om prøven og opptaksbetingelser samt en lang rekke med: $^{\circ}2\theta$ og **Intensitet (C.P.S.)** Når man klikker på **List** øverst i figur 2 får man fram en liste (Fig. 4) med disse dataene.

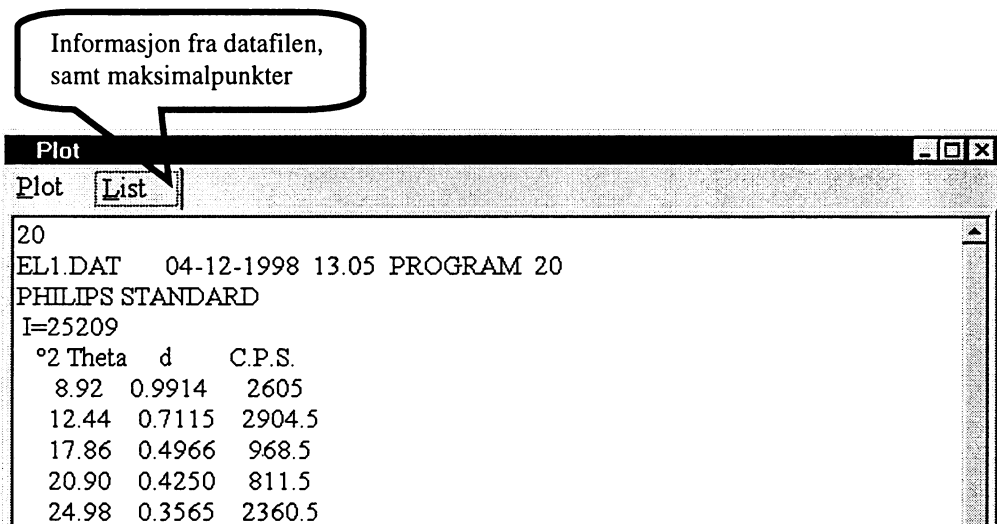


Fig. 4. List viser: Prøvenr. og program samt beliggenhet ($^{\circ}2\theta$), d -verdi (nanometer) og intensitet (CPS) for de sterkeste refleksjonene.

Flere kurver på en figur.

Som vist på figur 1 kan man ta inn flere kurver i Startmenyen. Hvis man har valgt to kurver og klikker på Plot så får man, som vist på figur 2, to kurver på samme figur. Ofte ønsker man å skille kurvene: Det kan man gjøre med **Move plot** kommandoene i Startmenyen. Før man gjør det må man ha valgt hvor mye man vil flytte kurven opp eller ned med et tasteklikk. Gå inn i Setup-menyen og velg en verdi for **Move step (CPS)**. Når denne verdien er valgt kan man med "pekefinger"-tastene flytte den kurven som er markert (hake foran navn) opp eller ned.

Andre kommandoer:

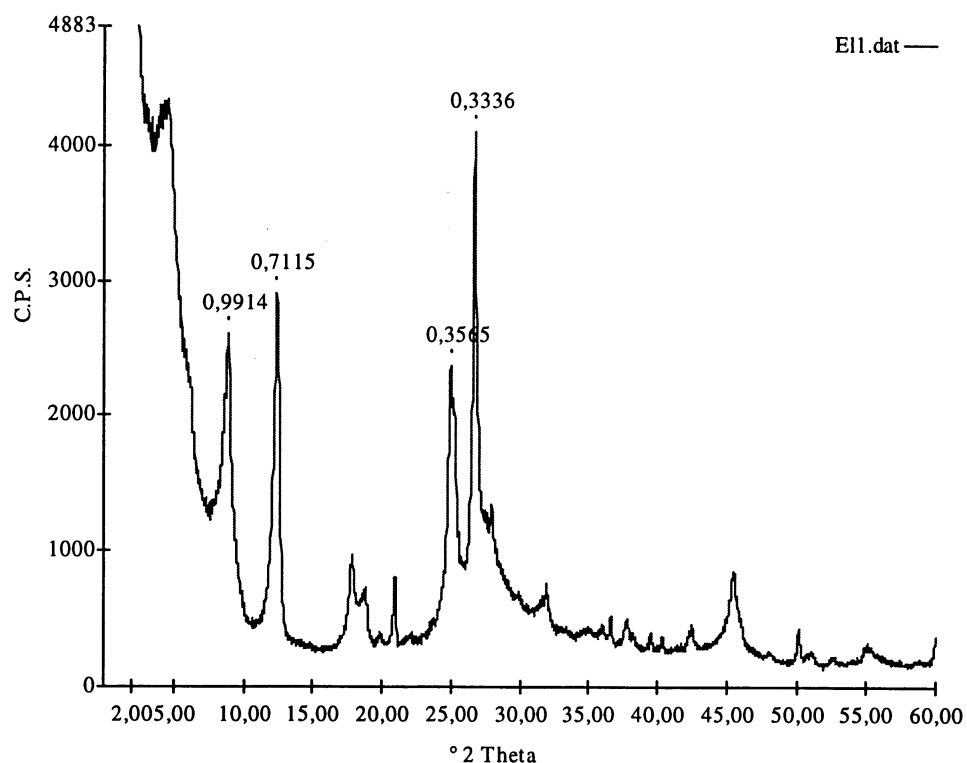
Iblant er toppene i et diffraktogram litt forskjøvet mot høyere eller lavere d-verdier. Man kan korrigere dette med **Move step** kommandoen i Setupmenyen ($^{\circ}2\theta = ^{\circ}2\theta$). Man velger en verdi f.eks. $0,01^{\circ}$. Man kan nå flytte kurven langs 2θ -aksen med "pekefinger"-tastene i Startmenyen.

Høyere oppløslighet.

Når man ønsker å få et utsnitt av diffraktogrammet med høyere oppløslighet kan man, som vist i figur 2, zoome inn: Plasser viser i utsnittets øvre venstre hjørne, hold venstre museknapp nede og dra viser til utsnittets nedre høyre hjørne. Man zoomer ut igjen ved å klikke på Plot i Startmenyen.

Å sammenligne med kjente mineraler.

Hvis man legger røntgenkurven til et rent mineral sammen med den kurven man skal tolke så kan man lett avgjøre om den prøven man arbeider med har de samme refleksjonene og relative intensiteter som det kjente mineralet.



Figur 5. Med kommandoen Copy ble diffraktogrammet lagt ut på utklippstavlen. Deretter ble det tatt inn i et Word-dokument med Paste (Lim inn).

De to neste figurene viser bruk av forskjellig linjetykkelse (Pen nr.) ved utskrift av diffraktogram.

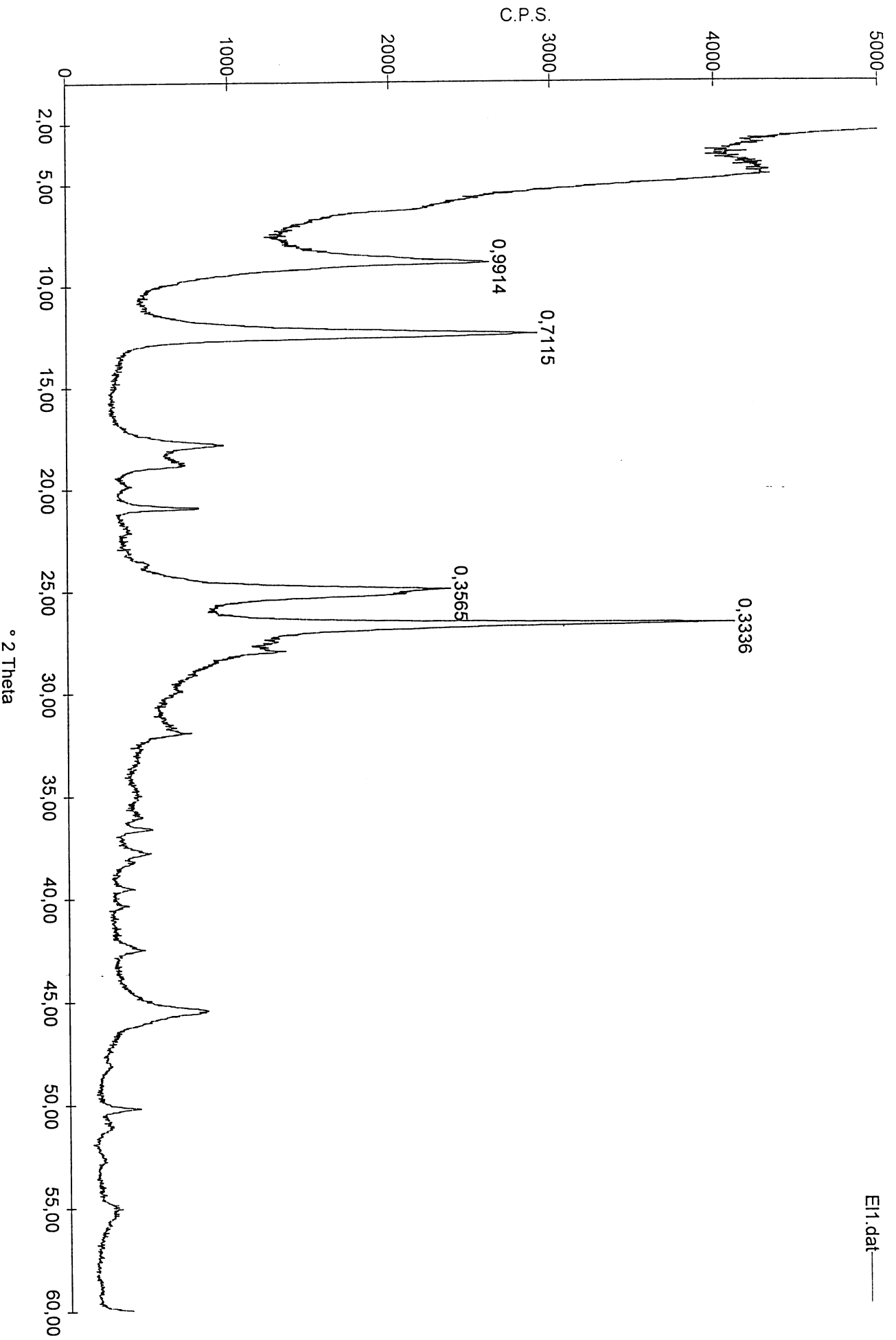


Fig. 6. Kurve tegnet med Pen 3.

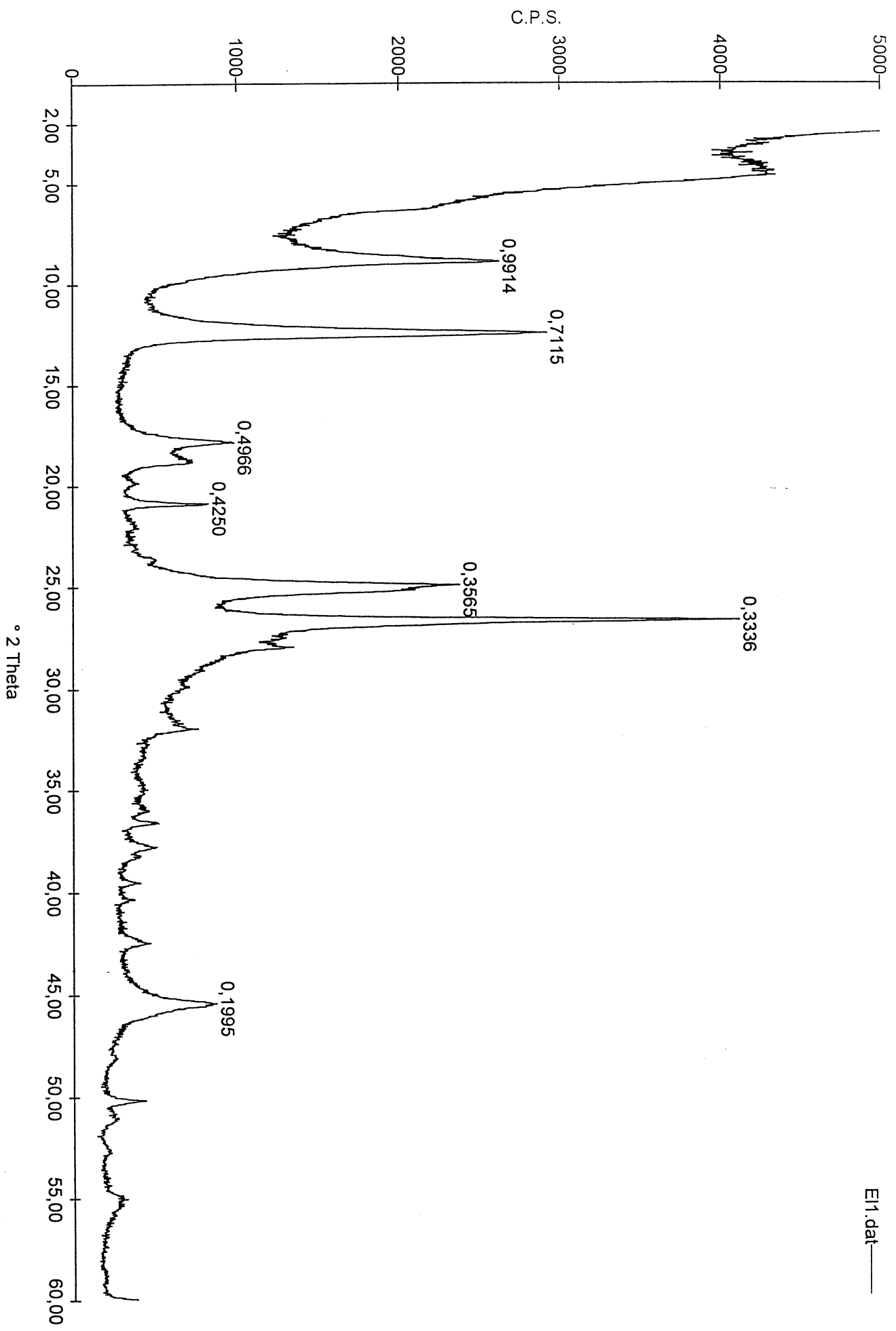
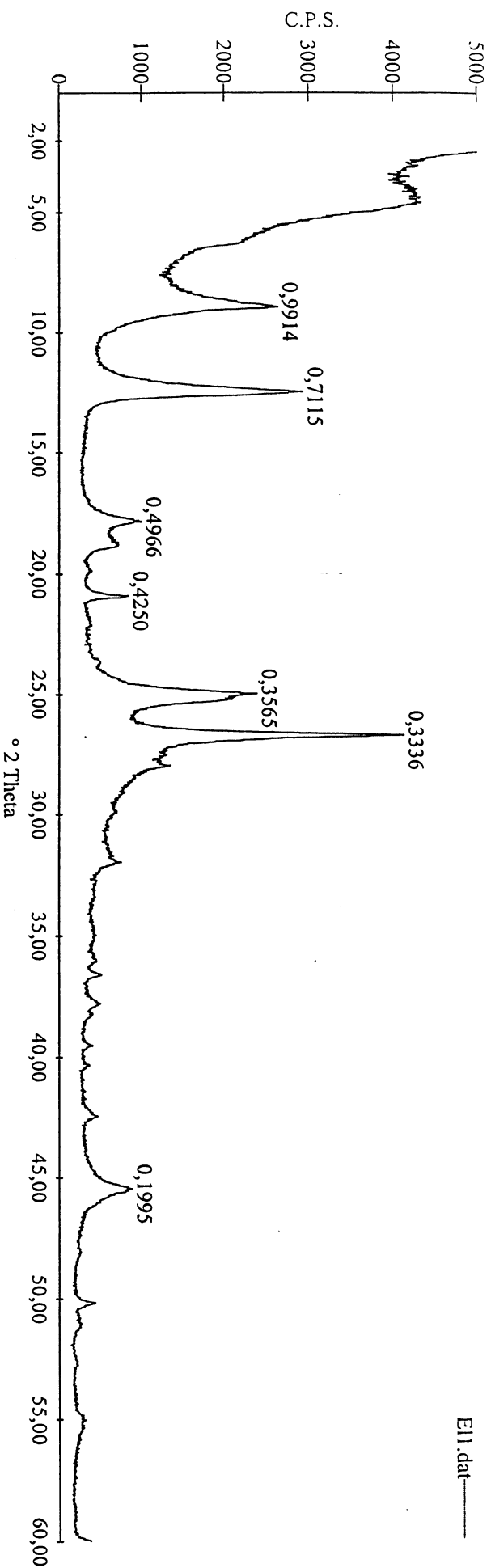


Fig. 7. Kurve tegnet med Pen 5



20

EL1.DAT 04-12-1998 13.05 PROGRAM 20

PHILIPS STANDARD

I=25209

2θ	d	C.P.S.
8,92	0,9914	2605
12,44	0,7115	2904,5
17,86	0,4966	968,5
20,90	0,4250	811,5
24,98	0,3565	2360,5
26,72	0,3336	4101,5
45,46	0,1995	856,5

Fig. 8. Røntgenkurve og liste på samme uskriфт.