



• • • • • Testing • Research • Consulting

Workshop „Rietveld Refinement with Profex“

Lesson 7: Exercises 1 and 2

Nicola Döbelin

RMS Foundation, Switzerland

March 07-08, 2024

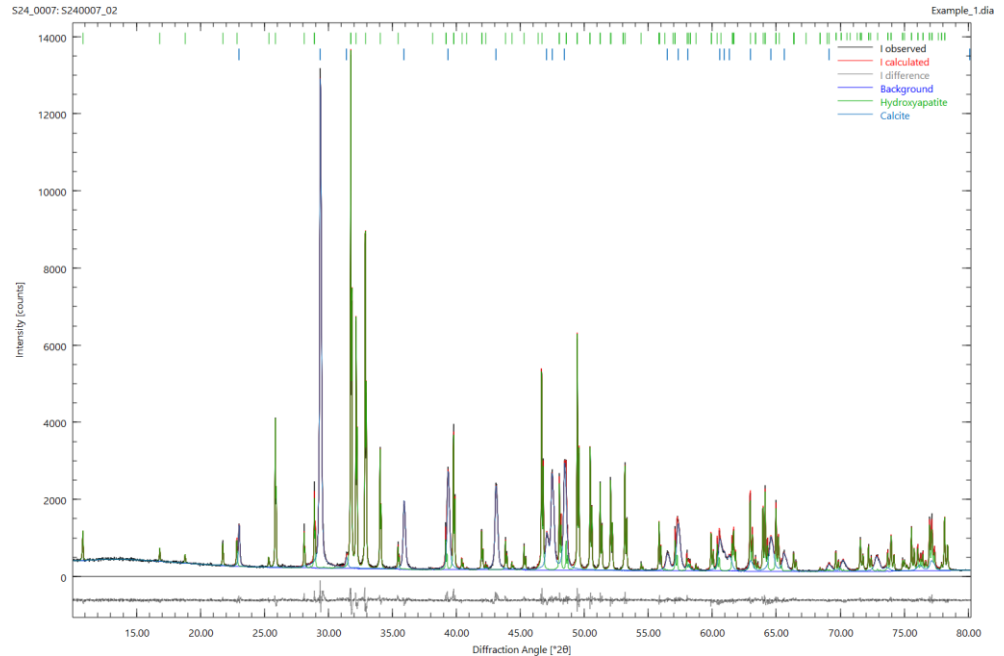
Forschungszentrum Jülich, Germany



Exercise 1

- Optimize refinement of Example 1:
 - Refine Ca substitution for Mg in Calcite
 - Refine Ca substitution for Na in Apatite-OH
 - Optimize profile refinement (B1, k2, k1, GEWICHT)
 - Goal: $\chi^2 = 1.41$

Synthetic mixture of
50.00 wt-% Calcite + 50.00 wt-% Apatite-OH



Exercise 2

- Modify the RMS-D8-ADS-15-LynxEyeXE instrument configuration for dataset 240227-02
 - First refine dataset 240227-01 with the unmodified configuration
 - Goal: $\chi^2 = 0.94$
 - Then modify the instrument configuration and use it for dataset 240227-02
 - Goal: $\chi^2 = 0.91$

Messbedingungen	
Scan-Typ	Coupled TwoTheta/Theta
Mess-Modus	Continuous PSD fast
Scan-Status	Completed
Start	20.000 °
Ende	120.005 °
Schrittweite	0.012 °
Schritte	8164
Zeit pro Schritt	19.20 s
Zeit/Schritt	0.10 s
Start-Zeit	00:00:00
Wartezeit	0.0 s
Goniometer-Radius	350.0 mm

Antriebe	
Strahl-Translation	0.00 mm
Probenrotationsgeschwindigkeit	30.000 1/min

Umgebung	
Wellenlänge	240227-01.brml

Röntgeneratore	
Detektor	

Detektor	
Detektor-Name	LYNXEYE_XE (1D Modus)
LynxEye 0D	<input type="checkbox"/>
Detektor-Öffnungswinkel	2.352 °
Detektor-Spaltweite	9.000 mm
Untere Diskriminatorschwelle	0.208 V
Obere Diskriminatorschwelle	0.232 V

Blenden	
Sekundäre Soller-Blende	2.500 °
Luftstreu-Blende	<input type="checkbox"/>
Divergenz-Blende	15.000 mm
Streustrahl-Blende	3.030 °
Blenden-Modus	Variabel
Simul. Blenden-Modus	

Messbedingungen	
Scan-Typ	Coupled TwoTheta/Theta
Mess-Modus	Continuous PSD fast
Scan-Status	Completed
Start	20.000 °
Ende	120.005 °
Schrittweite	0.012 °
Schritte	8164
Zeit pro Schritt	28.80 s
Zeit/Schritt	0.15 s
Start-Zeit	00:00:00
Wartezeit	0.0 s
Goniometer-Radius	350.0 mm

Antriebe	
Strahl-Translation	0.00 mm
Probenrotationsgeschwindigkeit	30.000 1/min

Umgebung	
Wellenlänge	240227-02.brml

Röntgeneratore	
Detektor	

Detektor	
Detektor-Name	LYNXEYE_XE (1D Modus)
LynxEye 0D	<input type="checkbox"/>
Detektor-Öffnungswinkel	2.352 °
Detektor-Spaltweite	9.000 mm
Untere Diskriminatorschwelle	0.208 V
Obere Diskriminatorschwelle	0.232 V

Blenden	
Sekundäre Soller-Blende	2.500 °
Luftstreu-Blende	<input type="checkbox"/>
Divergenz-Blende	0.300 °
Streustrahl-Blende	3.030 °
Blenden-Modus	Fest
Simul. Blenden-Modus	

Find the difference

