

Analyse quantitative analysis avec **FullProf** en mode *pattern matching*

(T.R./Juin 2009)

Comme expliqué dans le fichier `fp2k.inf` qui regroupe les nouveautés implémentées dans le programm **FullProf**, en date du 9 février 2007 :

Il est désormais possible de créer une base de données avec **FullProf** dans le but d'effectuer une analyse quantitative. Les facteurs de structure calculés pour une phase cristalline particulière peuvent être stockés dans un fichier en utilisant `HKL=5` (note du 3 juillet 2003). Dans ce fichier, une nouvelle ligne contenant le groupe d'espace et les paramètres de maille a été incluse. Le fichier créé au format `HKL=5` peut ensuite être renommé de manière arbitraire et être lu par le fichier `.pcr` pour l'affinement du mélange de phases, avec `NAT=0`, `JBT=-3` et `IRF=2`. Dans ce fichier `.pcr`, après le nom de la phase et en utilisant les instructions `COMMANDS`, on peut écrire explicitement le nom du fichier `.hkl` à lire, après le mot clé `FILE_HKL`. Le format de la commande est le suivant :

```
FILE_HKL n_pat my_hkl_file_name
```

où : `n_pat` est le numéro du diagramme pour lequel le fichier `my_hkl_file_name`, contenant les facteurs de structure, est donné. Si le groupe d'espace et les paramètres de maille ne coïncident pas avec ceux contenus dans le fichier `my_hkl_file_name`, les valeurs stockées dans ce fichier seront recopiés dans le fichier `.pcr`. Les paramètres de maille seront recopiés seulement dans le cas où la somme des différences absolues est supérieure à 4. Dans le cas contraire, les paramètres du fichier `.pcr` seront conservés.

Dans l'exemple suivant, le groupe d'espace et les paramètres de maille sont importés du fichier `quant.hkl`.

```
!-----  
! Data for PHASE number:   1 ==> Current R_Bragg for Pattern#  1:   0.23  
!-----  
My Phase name  
!  
COMMANDS  
..... (other commands)  
file_hkl 1 quant.hkl  
..... (other commands)  
END COMMANDS  
!Nat Dis Ang Pr1 Pr2 Pr3 Jbt Irf Isy Str Furth      ATZ      Nvk Npr More  
   0   0   0 0.0 0.0 1.0  -3   2   0   0   0      2147.799   0   7   0  
!  
P 1                      <--Space group symbol  
!-----> Profile Parameters for Pattern #  1
```

!	Scale	Shape1	Bov	Str1	Str2	Str3	Strain-Model	
	13.492	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0	
	11.00000	0.000	.000	0.000	0.000	0.000		
!	U	V	W	X	Y	GauSiz	LorSiz	Size-Model
	0.0161020	-0.00158	0.00291	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0
	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
!	a	b	c	alpha	beta	gamma	#Cell Info	
	0.00000	0.000000	0.000000	90.000000	90.000000	90.000000		
	31.00000	41.00000	21.00000	0.00000	0.00000	0.00000		
.....								