

A

用Rietica处理中子粉末衍射实验数据的方法

@张莉\$中国原子能科学研究院核物理研究所!北京102413 @陈东风\$中国原子能科学研究院核物理研究所!北京102413 @薛艳杰\$中国原子能科学研究院核物理研究所!北京102413 @张百生\$中国原子能科学研究院核物理研究所!北京102413 @王光军\$中国科学院物理研究所磁学国家重点实验室!北京100080 @李庆安\$中国科学院物理研究所磁学国家重点实验室!北京100080 @鲁毅\$中国科学院物理研究所磁学国家重点实验室!北京100080 @成昭华\$中国科学院物理研究所磁学国家重点实验室!北京100080

收稿日期 2003-5-29 修回日期 网络版发布日期:

摘要 介绍了基于Rietveld轮廓精修方法的粉末衍射轮廓精修程序Rietica处理中子粉末衍射数据的方法,并以钙钛矿锰氧化物La_{0.69}Ca_{0.31}Mn_{0.96}Fe_{0.04}O₃的拟合过程为例,具体说明了输入参数文件和数据文件的编写方法和程序运行方法。

关键词 [中子粉末衍射](#) [Rietveld轮廓精修方法](#) [Rietica执行程序](#)

分类号 [O571.56](#) [TP319](#)

A Method of Analyzing Neutron Powder Diffraction Data by Rietica

ZHANG Li, CHEN Dong-feng, XUE Yan-jie, ZHANG Bai-sheng, WANG Guang-jun, LI Qing-an, LU Yi, CHENG Zhao-hua(China Institute of Atomic Energy, P.O. Box 275-30, Beijing 102413, China; State Key Laboratory of Magnetism, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract A friendly graphic user interface and running method of profile refinement program(Rietica) for thermal neutron powder diffraction are introduced in the paper. The details of inputting parameters files, data files and executing Rietica program are described by taking the refinement of La_{0.69}Ca_{0.31}Mn_{0.96}Fe_{0.04}O₃ as an example.

Key words [neutron powder diffraction](#) [Rietveld method](#) [Rietica program](#)

DOI

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [\[PDF全文\]\(452KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“中子粉末衍射”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)