

SIMPAT: simulation de profil de réflexions

(T.R./CDIFX/2008-2013)

Modélisation d'une réflexion

Le programme **SIMPAT** permet de simuler le profil d'une ou plusieurs réflexions. Le calcul effectué par **SIMPAT** peut se résumer par la relation suivante :

$$y_i^{calc} = b f_i + \sum_{\{H\}} I_H \cdot \Omega_H$$

où :

- y_i^{calc} est le comptage calculé à la position angulaire i
- $b f_i$ est le bruit de fond à la position angulaire i , décrit soit par un polynôme d'ordre maximum 6, soit par interpolation linéaire de points de bruit de fond stockés dans un fichier
- $\sum_{\{H\}} I_H \cdot \Omega_H$ représente la somme effectuée sur toutes les réflexions H du produit entre l'intensité intégrée de la raie H et la fonction de profil normalisée de la réflexion H , décrivant ainsi la répartition de l'intensité intégrée autour la position de la réflexion x_H

La fonction de profil Ω_H est, une fonction de type pseudo-voigt ($pV(x)$), combinaison linéaire d'une fonction gaussienne $G(x)$ et lorentzienne $L(x)$:

$$pV(x) = (1 - \eta) \cdot G(x) + \eta \cdot L(x)$$

avec :

$$G(x) = a_G \cdot \exp\{-b_G \cdot x^2\}$$

$$a_G = \frac{2}{\Delta} \cdot \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}$$

$$b_G = \frac{4 \ln 2}{\Delta^2}$$

et

$$L(x) = \frac{a_L}{1 + b_L \cdot x^2}$$

$$a_L = \frac{2}{\pi \Delta}$$

$$b_L = \frac{4}{\Delta^2}$$

Δ représentant la largeur de raie à mi-hauteur de la réflexion.

Fichier d'entrée

Tous les paramètres décrivant les conditions du calcul à effectuer sont contenus dans un fichier d'entrée. Ces paramètres sont de deux catégories :

- paramètres globaux, définis à l'aide de mots clés, suivis du caractère "=" et de la valeur correspondante :
 - 2theta_MIN= : angle de départ du domaine angulaire
 - 2theta_MAX= : angle final du domaine angulaire
 - 2theta_STEP=: pas
 - BACKGROUND= : coefficients (maximum 6) du polynôme décrivant le bruit de fond
 - BACK_FILE= : nom du fichier contenant les points du bruit de fond (format 2 colonnes)
 - NPROF= : numéro de la fonction de profil utilisée (par défaut NPROF=5: pseudo-Voigt; NPROF=7 : Voigt)
- paramètres relatifs aux différentes réflexions à simuler : position angulaire x_H , intensité intégrée I_H , largeur de raie à mi-hauteur Δ_H , composante lorentzienne η_H (ou H_G et H_L si NPROF=7)

Exemples de fichier d'entrée:

```
! Profil : pseudo-Voigt
! Reflexions list: position, intensity, FWHM, eta
!-----
2theta_MIN = 10
2theta_STEP= 0.02
2theta_MAX = 130
BACK_FILE = bg90.xy
 10.  1151    0.10  0.10
 20.   207    0.10  0.12
 30.  8576    0.10  0.14
 40.  5271    0.10  0.16
 50.   613    0.10  0.18
 60.  1108    0.10  0.20
 70.   365    0.10  0.22
 80.   190    0.10  0.24
 90.   131    0.10  0.26
100.  1098    0.10  0.28
110.   896    0.10  0.30
120.  1731    0.14  0.32

! Profil : Voigt
! Reflexions list: position, intensity, HG, HL
!-----
2theta_MIN = 10
2theta_STEP= 0.02
2theta_MAX = 130
BACK_FILE = bg90.xy
NPROF      = 7
 10.  1151    0.10  0.10
 20.   207    0.10  0.12
```

30.	8576	0.10	0.14
40.	5271	0.10	0.16
50.	613	0.10	0.18
60.	1108	0.10	0.20
70.	365	0.10	0.22
80.	190	0.10	0.24
90.	131	0.10	0.26
100.	1098	0.10	0.28
110.	896	0.10	0.30
120.	1731	0.14	0.32

Remarque : toute ligne commençant par le caractère '#' ou '!' sera interprétée comme une ligne de commentaire et sera ignorée de la lecture des paramètres.

Installation de SIMPAT

SIMPAT peut être téléchargé à l'adresse suivante :

<http://www.cdifx.univ-rennes1.fr/progs/simpat.zip>

et décompacté dans un répertoire accessible par l'intermédiaire de la variable d'environnement `path`. Cette archive contient les fichiers suivants :

- `simpat.exe` : programme exécutable
- `simpat_news.pdf` : fichier texte contenant les dernières modifications apportées au programme
- `ref_par.inp` : fichier exemple
- `simpat.pdf` : ce document

Exécution de SIMPAT

SIMPAT est un programme fonctionnant dans une fenêtre type DOS d'un environnement Windows, accessible par l'option suivante : **Démarrer/Exécuter/cmd** . A l'invite de commande, il faut se placer dans le répertoire de travail et taper l'instruction suivante :

```
d:\data\simul> simpat
```

L'affichage à l'écran est alors le suivant :

```
*****
```

```
Simulation of a diffraction pattern from a reflexions list
```

```
Each reflexion is characterized by:
```

- ```
. the 2theta position
. the integrated intensity
. the profile:
 - the full width at half maximum (FWHM)
 - the eta lorentzian component of a pseudo-Voigt profile
or
 - the FWHM of the gaussian and lorentzian part of a
 Voigt function
```

\*\*\*\*\*

> Enter name file containing the reflexions list :

et l'utilisateur est invité à entrer le nom du fichier d'entrée.

Il est par ailleurs possible de spécifier ce nom de fichier d'entrée en le passant comme argument en ligne de commande:

```
d:\data\simul> simpat ref_par.inp
```

D'autres arguments peuvent également être spécifiées en ligne de commande :

- **PLOT** : permet de visualiser automatiquement le fichier `simpat.xy` généré par **SIMPAT** et contenant, les données, sous la forme de couples  $\{x_i, y_i\}$ , du diagramme simulé.
- **PLOT\_ALL** : permet de visualiser automatiquement, en plus du fichier `simpat.xy`, les différents fichiers contenant les contributions des différentes individuelles.

Cette option de visualisation graphique n'est cependant fonctionnelle que si le programme **WinPLOT**R a été au préalable installé sur l'ordinateur de travail. Pour de plus amples informations sur **WinPLOT**R, consulter le site suivant :

<http://www.cdifx.univ-rennes1.fr/winplotr/winplotr.htm>