



Mehr Infos über MacDiff

Willkommen bei MacDiff!

MacDiff ist ein Programm zur Darstellung und Auswertung von Röntgenpulverdiffraktogrammen auf Apple Macintosh. Es ist als Ergänzung zu den Meß- und Auswerteprogrammen der Firmen Philips oder Siemens konzipiert und besitzt eine Benutzeroberfläche zur benutzerfreundlichen und interaktiven Behandlung von XRD-Profillinien. Es liefert gängige Linien-Korrekturverfahren (z.B. Ausreißer, Glättung, Divergenz, Alpha2-Stripping) und unterstützt die qualitative und quantitative Phasenanalyse. Durch die programmierbare Peakanalyse (Erfassung von Intensitäten, Peakflächen, Halbhöhenbreiten, etc.) bietet es darüber hinaus eine automatisierte Untersuchung ganzer Diffraktogramm-Serien. Mit Hilfe von Peakfits lassen sich die Anteile koinzidierende Linien berechnen. Der Anwender kann diese Messungen laufend kontrollieren und hat zudem die Möglichkeit, Korrekturen (z.B. durch manuelle oder berechnete Untergrundanpassungen) durchzuführen. Bei der Indizierung unbekannter Linien können vom Benutzer veränderbare Peak-Datenbanken eingesetzt werden. Die Diffraktogramme werden in hoher Auflösung gedruckt. Die Standard-Single-scan-Formate (Philips-APD oder diverse Siemens-RAW, ASCII, u.a.) werden automatisch erkannt. Daten und Graphiken können in die meisten Tabellenkalkulations- bzw. Vektorgraphikprogramme exportiert werden.

MacDiffs Einsatzgebiete reichen von Routineuntersuchungen in der Sedimentologie, insbesondere Tonmineralanalyse über die Auswertung von

Röntgendiffraktogrammen aller Arten von Gesteinen und Mineralen bis hin zur Phasenanalyse beliebiger kristalliner Substanzen.

MacDiff ist Freeware, kann also von jedermann kostenlos erworben und benutzt werden. Die Weiterverbreitung ist nicht beschränkt, außer wenn dadurch Profit erwirtschaftet wird. Die Rechte bleiben beim Autor. Die Benutzung geht auf eigenes Risiko.

Für den erfolgreichen Einsatz von MacDiff lesen Sie bitte die in [Englisch](#) oder [Deutsch](#) verfügbare Bedienungsanleitung. Wollen Sie über die Änderungen der letzten Versionen informiert werden, lesen Sie bitte die [MacDiff Release Notes](#) (in Englisch)

MacDiff wurde kontinuierlich zwischen den Jahren 1991 und 2001 entwickelt. Mit Erscheinen von Mac OS X endete die Weiterentwicklung doch die Software arbeitet noch im Mac OS Classic Modus. Auf allen neueren Macs mit Leopard oder Snow Leopard sowie auf Windows-PCs läuft MacDiff mit der [SheepShaver Virtual Machine](#).

Autorenadresse:

Dr. Rainer Petschick
Institut für Geowissenschaften
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main
Altenhöferallee 1
60438 Frankfurt am Main
Germany
Tel. 069-798 40192

e-mail: Petschick@em.uni-frankfurt.de

Systemanforderungen (2001)

Benötigt wird ein PowerMacintosh mit mindestens 8 MB RAM , besser 16 MB sowie ein Farbmonitor. Der RAM-Bedarf von MacDiff liegt bei mindestens 3,5 MB. Auf der Festplatte werden zwischen 2 und 8 MB Speicher benötigt.

Für alle Mac OS-Systeme älter als 8.0 wird die Systemerweiterung "Appearance Extension" sowie das Kontrollfeld "Appearance CDEV" benötigt, welches separat zum Downloaden zur Verfügung steht (Name: "Appearance Lib").

Minimales System:

Power Macintosh oder PPC-PowerBook der ersten Generation (PPC 601) mit 14"-Farbmonitor (800x600, mind. 256 Farben), System 7.1.2

Optimales System (insbesondere notwendig für Profil-Anpassungen):

Power Macintosh oder PPC-PowerBook der neuesten Generation (G3 oder G4) mit mind. 64 MB RAM, Farbmonitor 17 bis 21 Zoll (16 Mio Farben), System 8.x oder jünger.

Entwicklungsumgebung (bis 2000 entwickelt)

Die Software wurde mit der Visual Interactive Programming BASIC-Umgebung der Firma [Mainstay](#) geschrieben. Der Code wurde in ANSI-C konvertiert und mit [CodeWarrior](#) (heute Freescale) kompiliert.

Input - Output

Folgende Diffraktogramm Fileformate können gelesen werden:

- Philips ".RD" - APD- VMS-Format
- Philips ".RD" - APD- MSDOS-Format
- Philips APD - ASCII-MSDOS-Format (APD-"View Scan")
- Philips APD - APD-UDF-ASCII-MSDOS-Format
- Siemens ".RAW" - RAW2-MSDOS-Format
- Siemens ".RAW" - Neues RAW1 format
- Siemens ".RAW" - Altes RAW format
- ".MDI" ASCII Text Format
- ".OUT" ASCII Text Format
- Sietronic ".CPI" ASCII Text Format
- Lauterjung ASCII Text format
- SCINTAG 2000 ASCII Format

Es können nur Single scan files gelesen werdn.

Nicht mehr als 16768 einzelne counts in einem File.

Count Limit: 1.000.000 (counts grösser als 1.000.000 können auf 10% erniedrigt werden).

Geschrieben werden können folgende Fileformate:

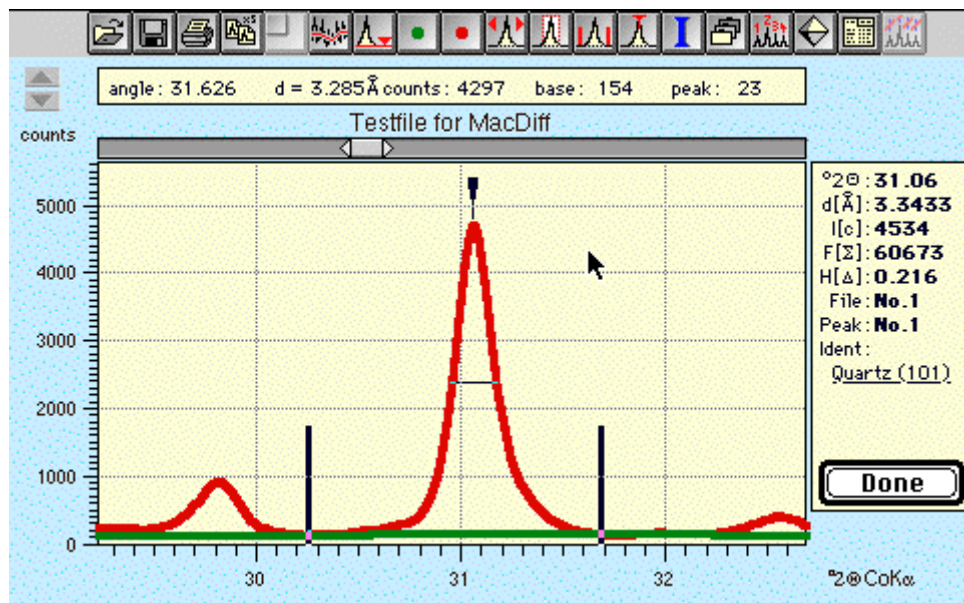
- Philips APD - APD-UDF-ASCII-MSDOS-Format
- ".MDI" ASCII Text Format
- Sietronic ".CPI" ASCII Text Format
- MacXFit of H.Stanjek, Freising, TU München
- Text-ASCII (Winkel, Count [, Untergrund] - verschiedene Delimiter möglich)
- MacDiffs natives kompaktes und schnelles DIFF Format (Version 2/3 oder 4)

Liste einiger Features:

- Bis zu 10 farbige Diffraktogramme in unabhängigen Fenstern.
- Bis zu 7 multiple Diffraktogramm-Profile in einem Diagramm.
- Max. 16.383 Einzeldaten und max. 1.000.000 Counts pro Einzelwert.
- Beliebige zoomfähige Diffraktogrammgröße.
- Veränderbare Linienfarbe, -größe und -typ.
- Veränderbare Achsenarten (normal, invertiert, quadriert, logarithmisch, als d-Werteskala).
- Buttonleiste für 20 häufig verwendete Programmfunktionen.
- Ausschaltbare Untergrundlinie.
- Optimierte Schnellanzeige und schnelles Bildschirm-Neuzeichnen.
- Maus-sensitives Vergrößern und Scrollen.
- Cursor-sensitive Winkel-, d-Wert und Countanzeige.
- Qualitativer Ausdruck, farbig (falls gewünscht), mit optionalem Logo.
- Druckt und speichert Listen der Counts und aller gemessenen Daten.
- Import der "guten alten" analogen Diffraktogramme auf Schreiberpapier über Scanner oder über Graphik-Tablett.
- Import von Scans von Debye-Scherrer- oder Guinierkamera-Photos
- Export von Vektorgraphiken über Clipboard oder über PICT-Dateien, auch in 5 x Vergrößerung
- Editierbare Counts und Untergrund-Werte.
- Optionale Debye-Scherrer artige Filmdarstellung.
- Einfache oder Multipeak-Korrektur
- Ausreisser- und Divergenzfilter, Countglättung, Alpha-2 stripping.
- Einfache mathematische Manipulationen.
- Änderung des K-Alpha-Typ (ohne Neuberechnung).
- Neuberechnung auf andere Wellenlängen/K-Alpha-Typ und Schrittweite.
- Berechnung von Mittleren Diffraktogrammen aus mehreren Profilen.
- Diffraktogramm-Subtraktion.
- Untergrundbestimmung (automatisch oder vom Benutzer manipulierbar).
- Untergrundlinie kann editiert und abgespeichert werden (MacDiff Dateiformat).
- Peakanalyse nach Doppelklick: d-Wert, Intensität, Peakfläche, and Halbhöhenbreite als Standardwerte.
- Peakfit (Gauss, verschiedene Lorentz, Pearson VII, und Pseudo Voigt) - Einzelfit oder Mehrfachfit von bis zu 7 Peaks.
- Peaksucheroutine.
- Labels (Kommentieren) von Einzelpeaks.

- Etwa 30 optional berechenbare Peakparameter (u.a.. Halbflächen, Integralbreiten).
- Eingebaute JCPDS (PDF)-artige Peakdatenbankumgebung.
- PDF (Power Diffraction File)-Daten können importiert werden.
- Erzeugt künstliche (synthetische) Diffraktogramme aus Records der Peakdatenbank.
- Kommt mit Peakdatenbanken von etwa 22.000 Peaks von mehr als 500 gesteinsbildenden Mineralen.
- Verlinkt einen Peak mit der indizierten Peakdatenbank zum Identifizieren.
- Peakidentifizierungsroutine, ebenfalls verlinkbare mit der Peakdatenbank.
- Benutzerspezifisch definierbares Analysaprogramm für die Bestimmung der Daten von bis zu 32 Peaks.
- Semi-automatische Peakberechnungen mittels File sessions (Batch von bis zu 255 Profilen).
- Reports aller Peakdaten, Export als TEXT-Dateien.
- Automatische Halbhöhenbreiten-Kalibrierungen von bis zu fünf unterschiedlichen Peaks.

Beispiel Screenshots:



Analyse des Quarz (101) Peaks

Peak Database: Minerals

Record No. 176 of 240 l o c k e d ! File: Minerals

Quartz (Alpha Quartz) Lake Toxaway,
Pattern at 25°C

#Ref.No.: JCPDS 5-0490 Comment:

Formula: SiO₂

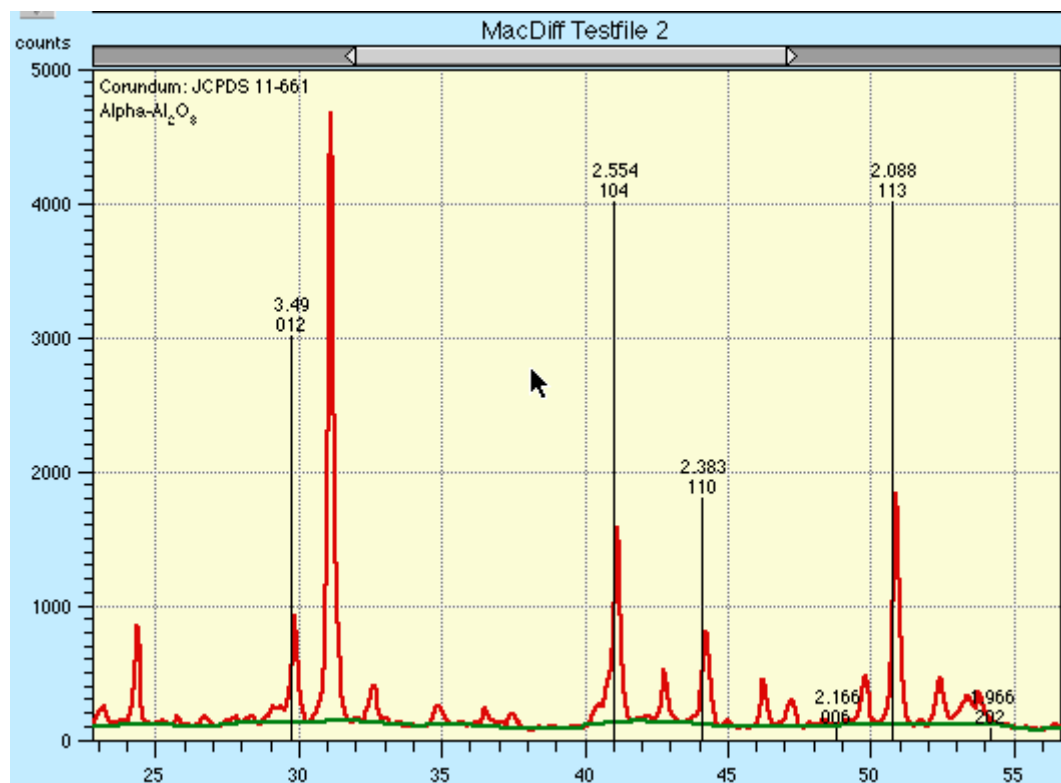
Hexagonal

No.	d Å	I/100	hkl	No.	d Å	I/100	hkl	No.	d Å	I/100	hkl
1	4.26	35	100	9	1.801	1	003	17	1.375	11	203
2	3.343	100	101	10	1.672	7	202	18	1.372	9	301
3	2.458	12	110	11	1.659	3	103	19	1.288	3	104
4	2.282	12	102	12	1.608	1	210	20	1.256	4	302
5	2.237	6	111	13	1.541	15	211	21	1.228	2	220
6	2.128	9	200	14	1.453	3	113	22	1.1997	5	213
7	1.98	6	201	15	1.418	1	300	23	1.1973	2	221
8	1.817	17	112	16	1.382	7	212	24	1.1838	4	114

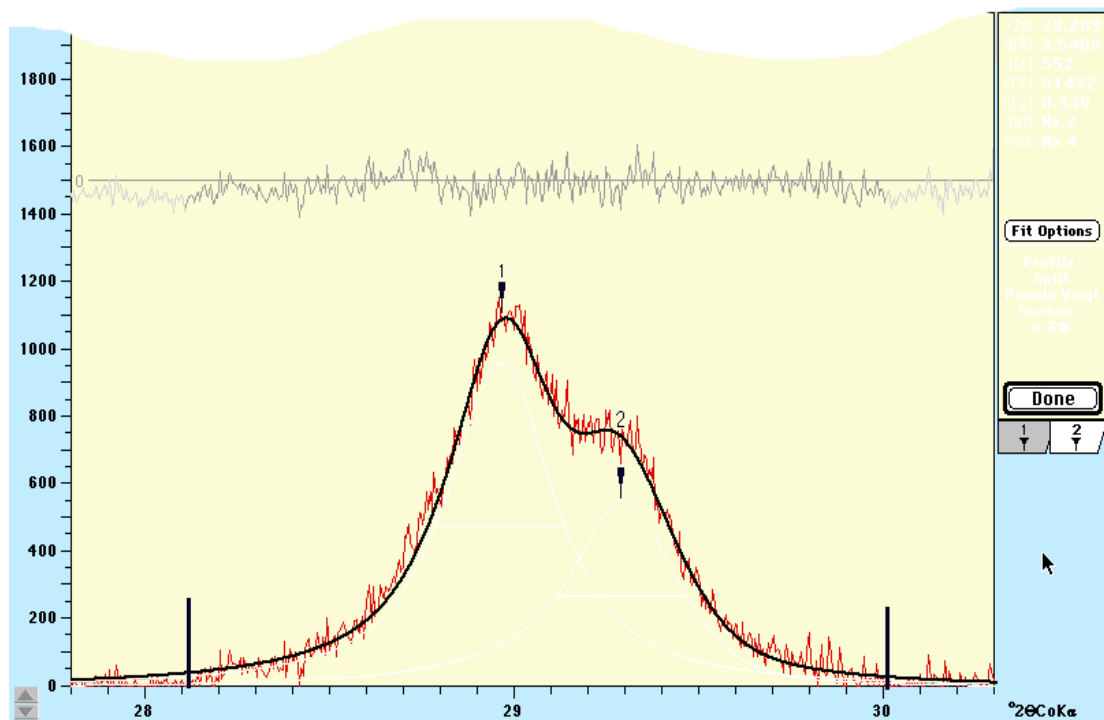
☐ Kill on Update ☒ Lock this Record ☐ Show 2°Thetas ☐ Auto Update

Create New Record Print... Goto... Update... Draw
 Copy List... Append... Done

Peakdatenbank Dialogfenster (hier gezeigt: Alpha Quarz)

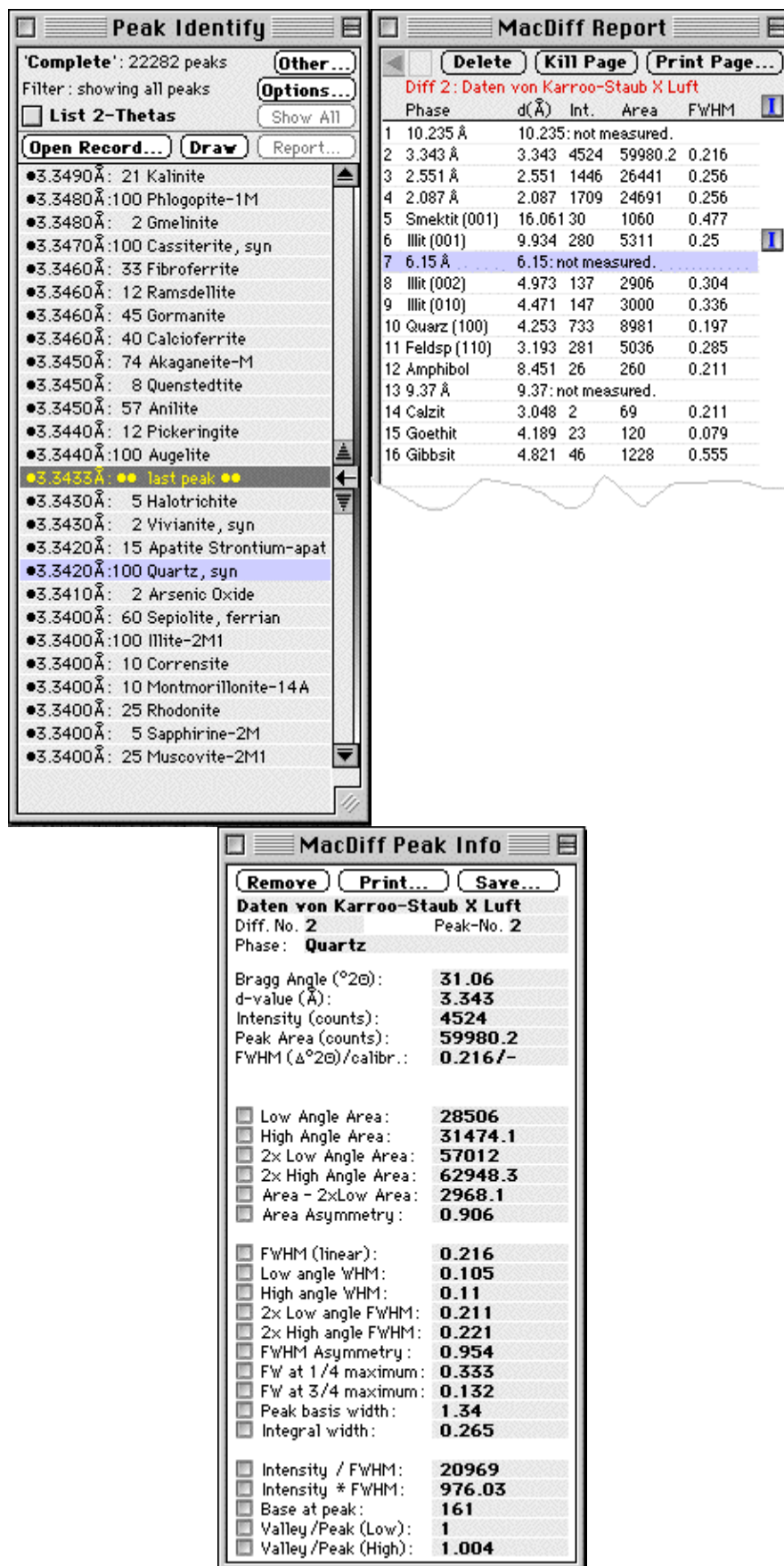


Vergleich des Messprofiles mit Linienmarker aus einer Peakdatenbank. Hier: Nachweis von Korund.



Peakfit-Analyse von Kaolinit (1) und Chlorit (2) (3.58 und 3.54Å). Profilkurve (blau): Pseudo Voigt (gesplitted). Schwarz: gemeinsame Gesamtkurve (Umhüllende), grau: Residuum-Kurve, rot: Rohdaten. Untergrund entfernt. Die Peakdaten-Anzeige zeigt die Daten des zweiten Peaks (Chlorit).

[Mehr zur Peakfit-Analyse...](#)



Drei sich selbständig updatende Fenster für die Anzeige und Verwaltung der Peak Identifizierung, Report-Daten und der erweiterten Peakdaten, die auch dauerhaft geöffnet bleiben können.

Danksagung:

Für all die kritischen Anmerkungen und für ihre Hilfe bei der Verbesserung von MacDiff danke ich

H. Bartl (Frankfurt, Germany)
H. Barwood (Bloomington, Indiana, U.S.A.)
M. Beck (Golden, Colorado, U.S.A.)
B. Bookhagen (Potsdam, Germany)
G. Bormann (Kiel, Germany)
J. Brugger (Basel, Switzerland)
F. Butt (Oslo, Norway)
B. Diekmann (Potsdam, Germany)
P. Covert (Seattle, U.S.A.)
H. Cynn (Livermore, California, U.S.A.)
W. Ehrmann (Halle, Germany)
R. Ferrell (Oslo, Norway / Zürich, Switzerland / Batton Rouge, U.S.A.)
R. Ferreira Mählmann (Basel, Switzerland)
F. Gingele (Warnemünde, Germany)
F. Girod (Lausanne, Switzerland)
H. Gorter (Eindhoven, The Netherlands)
H. Grobe (Bremerhaven, Germany)
U. Gronemann (BEB, Germany)
E. Hagen (Norway)
B. Haskell (Minneapolis, Minnesota, U.S.A.)
M. Herzog (Kronberg, Germany)
A. Kern (Frankfurt, Germany)
H. Kollmann (Frankfurt, Germany)
H. Krumm (Frankfurt, Germany)
S. Krumm (Erlangen, Germany)
G. Kuhn (Bremerhaven, Germany)
V. Kuhnert (Giessen, Germany)
H. LaViers (acpub.duke.edu)
Chao R. Li (U.S.A.)
B. Luckie (Mainstay, U.S.A.)
A. Menegatti (Zürich, Switzerland)
L. Morse (Pocatello, Idaho, U.S.A.)
J. Nakken (Oslo, Norway)
R. Oberhänsli (Potsdam, Germany)
H. Ortner (Innsbruck, Austria)
T. Pletsch (Hannover, Germany)
J. Rössler (Frankfurt, Germany)
M. Schrier (Berkeley, U.S.A.)
M. Schmith (Wilmington, North Carolina, U.S.A.)
H. Stanjek (Munich, Germany)
I. Steyer (Frankfurt, Germany)
M. Sturzenegger (Switzerland)
P. Talbot (Queensland, Australia)
M. Underwood (Columbia, Missouri, U.S.A.)

C. Vogt (Bremen, Germany)
L. Warr (Heidelberg, Germany)
J. Warren (Mitcham, Australia)
... und allen anderen Anwendern von MacDiff!

Rainer Petschick

[Zur R.Petschicks Software](#)



[Webmaster](#), Di. 08.03.2011 16:07