

A QSimRef - Eine graphische Benutzeroberfläche für SIMREF

Das in dieser Arbeit verwendete Rietveld-Programm (vgl. Kap. 2.2) SIMREF [10] [11] ist kommandozeilenbasiert. Das Programm liest zwei Textdateien ein, in denen die Parameter und Parameterfreigaben für den Rietveld-Fit stehen. Die Ausgabe erfolgt über mehrere Textdateien.

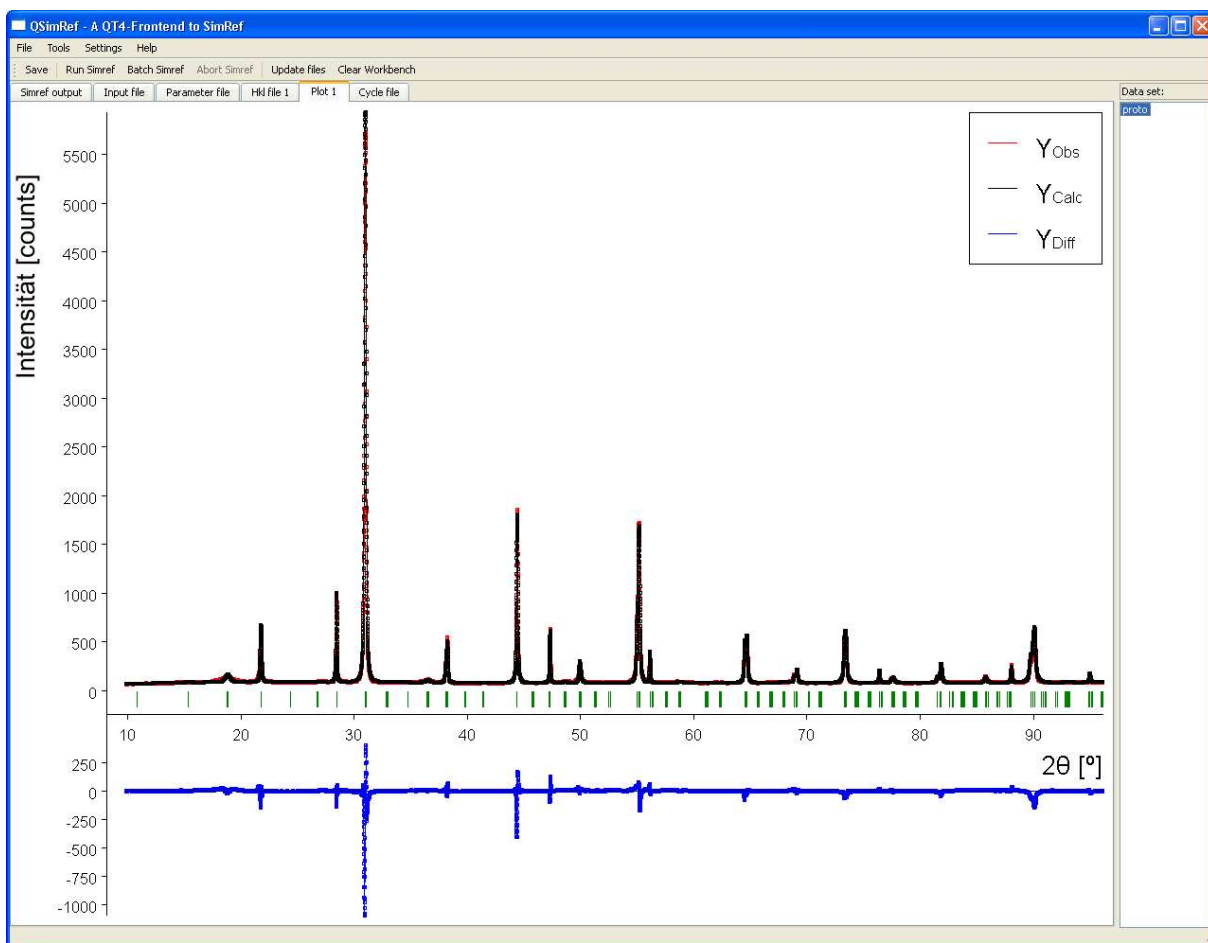


Abbildung A.1: Bildschirmfoto von QSimRef

Um die Arbeit mit SIMREF zu vereinfachen, wurde im Zuge dieser Arbeit eine graphische Oberfläche für SIMREF entwickelt (QSimRef), die in *C++* geschrieben ist und die Open-Source Version der Grafikbibliothek QT [31] verwendet. Insbesondere die praktische Darstellung des Plots war Ziel der Entwicklung. Abbildung A.1 zeigt ein Bildschirmfoto des Programms.

Programm-Features:

- Schneller Zugriff auf alle wichtigen Texteingabe- und Ausgabedateien mittels Reiternavigation. Nach erfolgter Berechnung werden diese automatisch neu geladen.

- Plotausgabe mit gemessenem und berechnetem Beugungsbild, Reflexmarker und Differenzplot. Die Datenpunkte werden angezeigt. Skalierung ist für beide Ansichten sinnvoll gestaltet. Eine mehrfache Vergrößerungsmöglichkeit wurde integriert.
- Speichern der Grafiken ist möglich. In dieser Version nur im JPEG-Format.
- Batch Möglichkeit für Simref, um mehrere Läufe hintereinander auszuführen. Die einzelnen Läufe werden in unterschiedlichen Dateien gespeichert und sind über die Datasetleiste umschaltbar.
- Arbeitsordner und SIMREF Version können leicht gewählt werden.
- Starten von SIMREF mittels einfachem Knopfdruck oder Tastenkombination
- Aufräumen des Arbeitsordners mittels einfachem Knopfdruck