



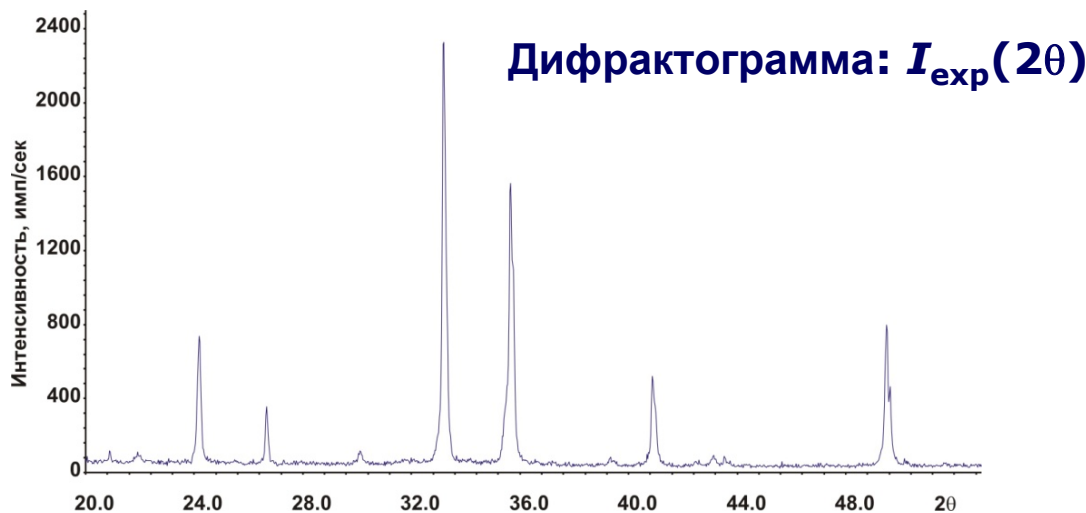
**Лаборатория Неорганической Кристаллохимии
Кафедра Неорганической Химии, Химический Факультет МГУ**

**Качественный рентгенофазовый анализ (РФА).
Базы данных ICDD.**

Москва 2014

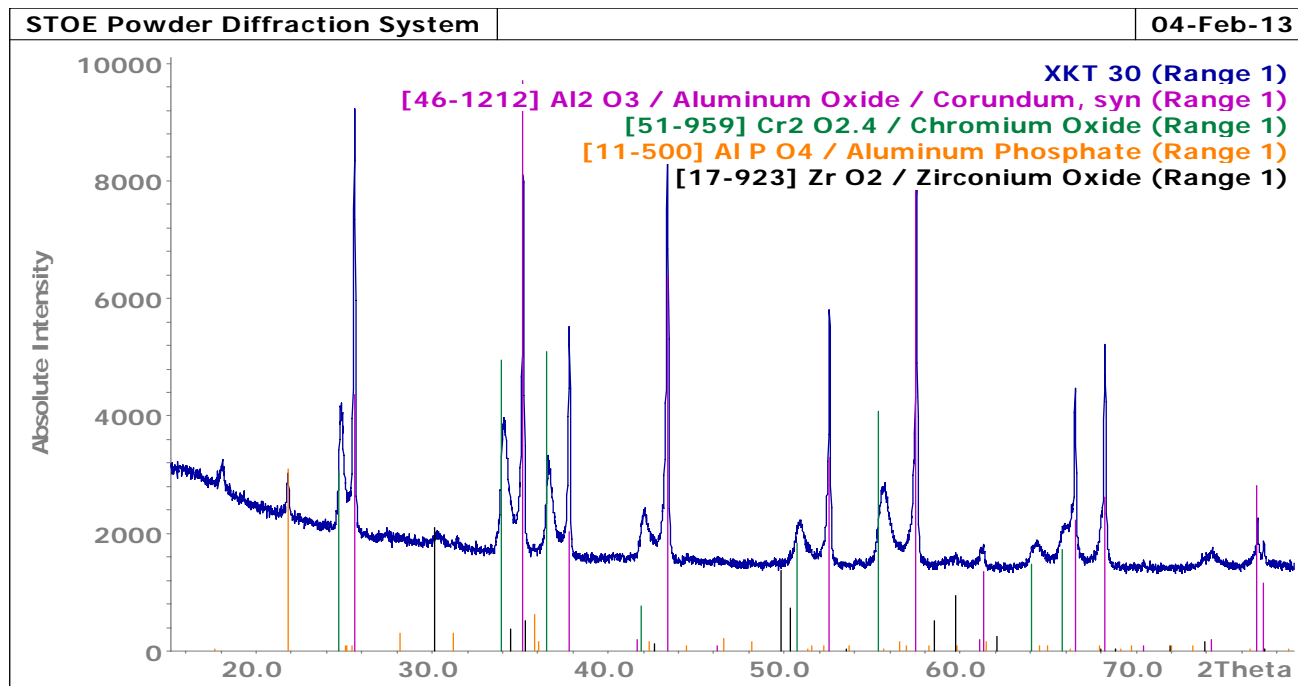
Физические основы РФА

1. Распределение $\rho(\mathbf{r})$ уникально для каждого соединения.
2. $\rho(\mathbf{r}) \leftrightarrow$ расположение атомов
2. От периодичности $\rho(\mathbf{r})$ (параметров ячейки кристалла) зависит положение максимумов.
3. От вида функции $\rho(\mathbf{r})$ (распределения атомов) внутри ячейки зависит интенсивность максимумов.
4. Ключ к РФА – интенсивность и положения максимумов. Определить их можно с использованием **профильного анализа**.



Физические основы РФА - 2

1. Дифрактограмма = «**отпечаток пальцев**» кристаллической фазы.
 - Дифрактограмма смеси фаз = суперпозиция дифрактограмм отдельных фаз.
2. Относительные интенсивности максимумов от разных фаз связаны с содержанием фаз в смеси – ключ к количественному РФА.
3. Как по виду дифрактограммы определить, что за фазы присутствуют в смеси? – **Сравнение с дифрактограммами стандартов.**



Базы данных ICDD

A comprehensive database of
powder diffraction patterns –
ICDD PDF
(International Centre for
Diffraction Data -
www.icdd.com)



Основан группой учёных в 1941

(ASTM – JCPDS – ICDD)

- ASTM – American Society for Testing Materials
- JCPDS - Joint Committee on Powder Diffraction Standards
- ICDD – International Centre for Diffraction Data

Некоммерческая организация – образование, стипендии и гранты

Членство учёных – прямое участие в деятельности организации через Совет директоров, комитеты и подкомитеты

1941

FOREWORD

This card file of X-ray diffraction data is published jointly by the American Society for Testing Materials and by the National Research Council through a Joint Subcommittee whose membership is drawn from the Committee on X-ray and Electron Diffraction of the Division of Chemistry and Chemical Technology of the National Research Council, and from Committee E-3 on Chemical Analysis of Metals, Subcommittee VI of Committee E-4 on Metallography, and Subcommittee IV of Committee E-7 on Radiographic Testing of the A. S. T. M. The membership of this Joint Subcommittee is as follows:

- W. P. Davey, *Chairman*, School of Chemistry and Physics, The Pennsylvania State College
- W. L. Fink, Research Laboratory, Aluminum Company of America
- M. L. Fuller, Research Laboratory, The New Jersey Zinc Co.
- J. D. Hanawalt, Research Laboratory, The Dow Chemical Co.
- V. Hicks, Bureau of Ordnance, Navy Dept., Washington, D. C.
- M. L. Huggins (*Ex-officio*), Research Laboratory, Eastman Kodak Co.
- P. F. Kerr, Department of Geology and Mineralogy, Columbia University
- J. Magos, Research Division, Crane Co.
- H. R. Nelson, Battelle Memorial Institute
- W. E. Richmond, U. S. Geological Survey
- L. L. Wyman, Research Laboratory, U. S. Geological Survey

The data included in this set is originally published by J. D. Hanawalt

Card 1, 1941

d	20.0	9.9	2.67	d in A $\lambda = .708$	$\frac{I}{I_1}$	d in A $\lambda = .708$	$\frac{I}{I_1}$
$\frac{I}{I_1}$	1.00	0.19	0.10	20.0	1.00		
I	40	7	4	9.9	0.19		
				3.40	0.05		
				3.22	0.03		
				3.15	0.03		
				2.78	0.03		
				2.67	0.10		
				2.06	0.03		
				1.93	0.05		
				1.89	0.10		
				1.61	0.05		
				1.57	0.03		
				1.52	0.03		
				1.330	0.03		
				1.240	0.03		
			Z =				
a ₀ =	b ₀ =	c ₀ =					
A =		C =		1.190	0.05		
D =							
n =	ω =	ϵ =					H

PDF

978 карточек

Hanawalt

PDF Growth



Release 2013

DATA ENTRY SOURCE

DATA ENTRY SOURCE	PDF-2 Release 2013	PDF-4+ 2013 WebPDF-4+ 2013	PDF-4/ Minerals 2013	PDF-4/ Organics 2014
00- ICDD	110,224	110,224	11,615	34,469
01- FIZ	144,604	59,850	10,608	6,540
02- CCDC	0	0	0	431,359
03- NIST	10,067	3,071	206	39
04- MPDS	0	167,276	17,986	0
05- ICDD Crystal Data	232	232	9	6,871
Total No. of Data Sets	265,127	340,653	40,424	479,278
New Entries	14,945	25,321	1,014	8,021
No. with atomic coordinates	0	227,102	28,723	51,538
Reference Intensity Ratio - I/I _c	167,539	243,065	29,487	460,062
Experimental Digital Patterns	0	8,032	94	4,261
Calculated Digital Patterns	0	340,653	40,424	479,278

База PDF для анализа материалов

1938

- РФА кристаллических материалов

2007

- РФА
- Количественный анализ
- решение структуры
- кристалличность, размер кристаллитов
- ориентация

После 2007

Несоразмерные структуры

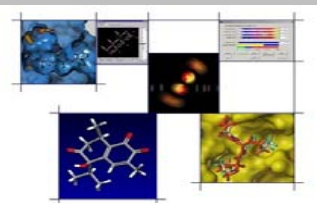
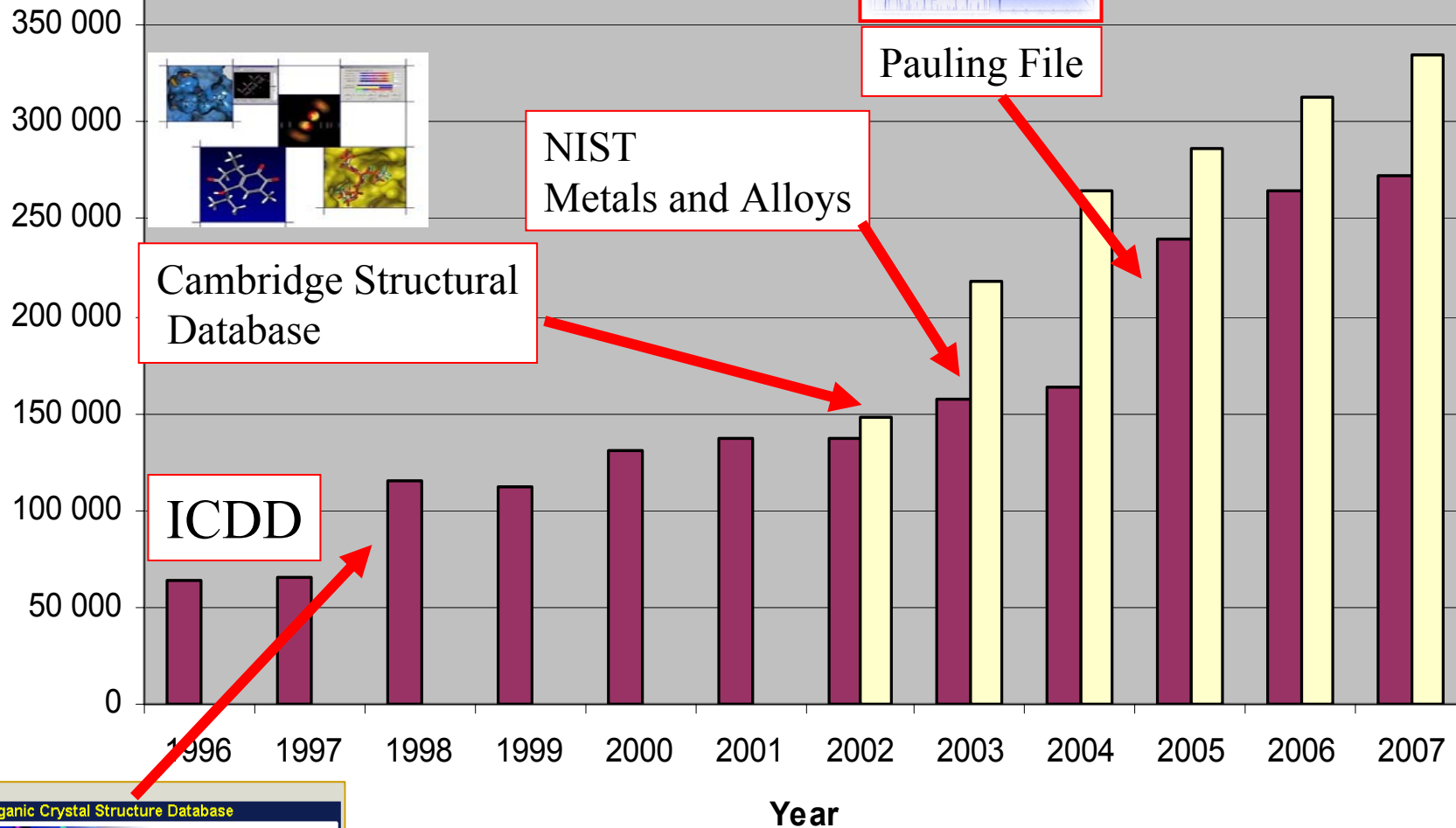
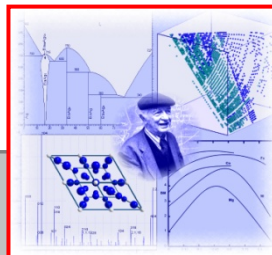
Аморфные материалы

2D Данные – Текстура/Ориентация

Полные дифрактограммы

Пять различных баз данных, участвующих в создании базы Powder Diffraction File

2007
>600,000
карточек



Cambridge Structural Database

NIST Metals and Alloys

Pauling File

ICDD

ICSD - Inorganic Crystal Structure Database
Inorganic Crystal Structure Database

Базы данных ICDD

БД PDF-2

- Постоянно редактируется, дополняется и обновляется
- Каждый год добавляется - 2,500 экспериментальных и несколько тысяч расчетных рентгенограмм.

Компьютерный поиск начиная с 1985 г.

- Содержит рентгенограммы чистых фаз
- Выпуск 2013г. содержит > 265,000 рентгенограмм
- Сейчас доступна в двух форматах:
 - CD-ROM диск (основной формат)
 - Книги (Sets 1-51 – только экспериментальные рентгенограммы)

Базы данных ICDD: структура карточки данных

Каждому стандарту присваивается уникальный номер:
XX-YYY-ZZZZ (шкаф – ящик – номер).

44-258



SbSBr	d,θ	Int.	hkl	d,θ	Int.	hkl
	Antimony Bromide Sulfide	6.296	26	110	1.9829	22
	4.876	3	020	1.8970	5	150,420
	4.195	27	120	1.8902	2	112
	4.119	9	200	1.8540	13	241,331
	3.794	16	210	1.8272	<1	401
Rad. CuKα ₁ λ 1.54056 Filter Mono. d-sp Diff.						
Cut off 14.7 Int. Diffractometer I/I_{cor.} 3.02	3.673	6	011	1.7955	12	411
Ref. Antipov,E., Putilin,S., Shpanchenko,R., Moscow State University, Moscow, Russia. <i>ICDD Grant-in-Aid.</i> (1993)	3.354	4	111	1.7616	5	250
Sys. Orthorhombic S.G. Pnam(62)	3.145	9	220	1.7115	<1	151
a 8.2370(5) b 9.7491(6) c 3.9646(3) A 0.8449 C 0.4067	3.023	1	130	1.6774	1	222
α β γ Z 4 mp 330d	2.8818	100	121	1.6562	3	431
Ref. Ibid	2.8550	15	201	1.6246	2	060,510
D_x 4.876 D_m SS/FOM F ₃₀ =158(.005,36)	2.7413	12	211	1.5935	3	160,431
Color Orange	2.6430	16	310	1.5860	4	312
Pattern taken at 26 C. The sample was provided by Shevelkov, A., Dikarev, E., Moscow State University, Moscow, Russia. CAS#: 14794-85-5. Prepared by heating of stoichiometric mixture of Sb, S and SbBr ₃ in sealed silica tube at 360 C for 10 hours followed by annealing at 310 C for 6 days. SbSBr melts with decomposition. Single crystal cell: a=8.212, b=9.720, c=3.963, S.G.=Pnam, Z=4, [Inushima, T., Uchinokura, K., <i>Jpn. J. Appl. Phys.</i> , 24 600 (1985)]. Silicon used as external standard. PSC: oP12.	2.5507	3	230	1.5730	1	440
	2.5136	16	031	1.5656	<1	232
	2.4641	4	221	1.5380	3	042
	2.4369	7	040	1.5266	3	322
	2.4037	12	131	1.5116	1	142,260
	2.3919	9	320	1.4762	<1	351
	2.3366	2	140	1.4692	2	530
	2.1992	3	311	1.4408	2	242,332
	2.0972	8	330	1.4124	<1	261
	2.0594	1	400	1.3986	<1	360
	2.0477	1	321	1.3779	1	531
	2.0131	5	141	1.3713	2	152

See follwing card.

Базы данных ICDD @ WinXPow

Формат «карточки» (записи о стандарте) PDF-2 в WinXPow.

[81-1286] PDF-2 Sets 1-99 Quality: C Wavelength: 1.540598

Lead Vanadium Oxide Phosphate
Pb3 (P V O8)

Rad.: CuK α 1 (1.54060) Filter: d-sp: calculated
I/Icor.:8.52 Cutoff: 17.7 Int.: calculated
Ref.: Calculated from ICSD using POWD-12++, (1997)

Sys.: Rhombohedral S.G.: R-3m (166) V(redu): 187.6
a: 5.64410(20) b: c: 20.40310(60) C: 3.6149
A: B: C: Z: 3 mp:
Dx: 7.357 Dm: SS/FOM: F30= 999.9 (.0001, 33)
ICSD: 072664

Ref.: Kiat, J.- M., Garnier, P., Calvarin, G., Pinot, M., J. Solid State Chem.,
103, (1993), 490

ea: nwB: ey: Sign: 2V:

REM TEM 300. // REM RVP.

Hanawalt: 3.13/X 2.82/8 4.75/3 3.53/3 2.10/3 1.68/2 1.88/1 2.20/1 1.77/1 1.63/1
Max-d: 6.80/1 4.75/3 4.41/1 3.53/3 3.40/1 3.13/X 2.82/8 2.61/1 2.50/1 2.43/1

d[A]	2Theta	Int.	h	k	l	d[A]	2Theta	Int.	h	k	l
6.8010	13.007	10	0	0	3	1.3602	68.986	6	0	0	15
4.7534	18.652	326	1	0	1	1.3527	69.425	7	1	3	1

Базы данных ICDD: «уровни качества стандартов»

Данные о качестве дифракционного стандарта

Знак "*".

1. Химически охарактеризован.
2. Интенсивности измерены инструментально.
3. Хороший диапазон и сглаженный разброс интенсивностей
4. Линии с $d \leq 2.50 \text{ \AA} : 2.222 \text{ \AA}$. $d \leq 1.200 \text{ \AA} : 1.1111 \text{ \AA}$.
5. Нет серьезных систематических ошибок.
6. Нет линий с $|\Delta 2\theta| \geq 0.05^\circ$.
7. Средняя величина $|\Delta 2\theta| \leq 0.03^\circ$.
8. Нет неиндексированных, примесных линий или линий, не соответствующих погасаниям.

Знак "I".

1. 1-3,6 выполняются менее жестко.
2. Линии с $d \leq 2.00 \text{ \AA} : 1.111 \text{ \AA}$.
3. Нет линий с $|\Delta 2\theta| \geq 0.2^\circ$.
4. Средняя величина $|\Delta 2\theta| \leq 0.06^\circ$.
5. Неиндексированных, примесных линий или линий, соответствующих погасаниям ≤ 2 , среди них нет сильнейших.

Базы данных ICDD: «уровни качества стандартов»

Знак "O".

1. 1-4 могут частично не выполняться.
2. Неиндексированных, примесных линий или линий, не соответствующих погасаниям >3.
3. Одна из 3-х сильнейших линий непроиндексирована.

Отсутствие знака (B)

1. Не выполняются критерии *, i, O.

Знак "C".

2. Рентгенограмма рассчитана из структурных данных

Название	Содержание	Центр
Cambridge Structural Database (CSD)	Organic, Organo-metallic	Cambridge, UK
Inorganic Crystal Structure Database (ICSD)	Inorganic Materials	Karlsruhe, Germany
NRCC Metals Data File (CRYSTMET)	Metals and Alloys	Ottawa, Canada
Protein Data Bank (PDB)	Biological Macromolecules	Brookhaven, USA
NBS Crystal Data NBS (CD)	Inorganic and Organic	Gaithersburg, USA

Знак "*" > Знак "I" > Знак "O" > Отсутствие знака (B)

Базы данных ICDD: алгоритмы поиска

Методы поиска соответствия «эксперимент – стандарт» - ***Search/Match***



***Автоматический
поиск***

Исходные данные: $\{d, I\}$

Параметры поиска:

1. $|\Delta 2\theta|_{max}$
2. Минимальная I_{exp}
3. Минимальное число линий соответствия
4. Максимальное число пропущенных линий
5. ...

Возможно введение дополнительных ограничений:
подбаза, качество...



Ручной поиск

Исходные данные: Input

Параметры поиска:

1. Сильнейшие линии (3) – **Hanawalt.**
2. Линии при малых углах (8 первых) – **Fink**
3. Элементный состав фазы
4. Формула, название, минерал, цвет...
5. Симметрия, параметры ячейки...
6. ...

Базы данных ICDD: критерии качества

Критерии качества для автоматического поиска.

$$F(\theta) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{i=1} |\theta_i^s - \theta_i^o|}{n_{\text{совп}} \Delta\theta}$$

$$F(I) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{i=1} |I_i^s - I_i^o|}{\sum_{i=1}^{i=1} I_i^s}$$

где n - общее число линий на рентгенограмме;
 s - для стандарта
 o - для наблюдаемой линии

После автоматического поиска результаты по умолчанию упорядочены по $F(\theta)$, после ручного – по номеру стандарта

Интерфейс поиска в старых версиях PDF-2: PCPDFWin

Search Files Logical Operators SubFiles Elements Names (slow) Misc Search Result Delete Back Help

CRITERIA HISTORY			
AND Exclude Del.	___	142806	
AND Exclude Alt.	___	134307	
AND Excl Non Amb.	___	126069	
AND Only Elements	0	Fe Mo	19

- StrongLines
- LongLines
- Reduced Cell Axis
- Density (Measured/Calculated)
- Reduced Cell Volume
- Reference
- Melting Point
- Colors
- Pearson Symbol Code
- Space Group
- Lattice Symmetry

- Crystal System Code
 - Anorthic (Triclinic)
 - Monoclinic
 - Orthorhombic
 - Tetragonal**
 - Hexagonal
 - Rhombohedral
 - Cubic
- Lattice Centering Code
- Number Atoms / Unit Cell

CRITERIA HISTORY			
AND Exclude Del.	___	142806	
AND Exclude Alt.	___	134307	
AND Excl Non Amb.	___	126069	
AND Only Elements	0	Fe Mo	19

SEARCH RESULT				
Display Matched Item Number: 1 to 19				
				Print Search Result
				OK
				Cancel
ID	Chemical Name	Chemical Formula	3 Strongest Lines	Sys
89-4313	Iron Molybdenum Oxide	Fe Mo O	2.09 2.16 1.60	H
89-2367	Iron Molybdenum Oxide	Fe (Mo O4)	3.40 3.39 3.30	M
89-2366	Iron Molybdenum Oxide	Fe (Mo O4)	6.33 3.17 2.11	M
83-1701	Iron Molybdenum Oxide	Fe2 (Mo O4)3	3.87 3.46 4.08	M
74-1429	Iron Molybdenum Oxide	Fe2 Mo3 O8	3.55 5.03 2.50	H
73-0236	Iron Molybdenum Oxide	Fe2 Mo O4	2.57 4.91 1.50	C
42-0324	Iron Molybdenum Oxide	Fe1.67 Mo1.33 O4	2.57 4.93 2.13	C
42-0317	Iron Molybdenum Oxide	Fe1.89 Mo4.11 O7	8.56 5.65 2.39	O
36-0526	Kamiokite, syn, Iron Molybdenum Oxide	Fe2 +2 Mo3 +4 O8	3.54 5.02 2.50	H
35-0183	Iron Molybdenum Oxide	Fe2 (Mo O4)3	3.24 3.89 3.92	M
33-0861	Iron Molybdenum Oxide	Fe2 (Mo O4)3	3.89 3.95 3.50	O
31-0642	Iron Molybdenum Oxide	Fe2 (Mo O4)3	3.87 3.47 3.93	M
28-0488	Iron Molybdenum Oxide	Fe Mo O4	3.37 3.79 2.02	X
25-1403	Iron Molybdenum Oxide	Fe2 Mo O4	2.57 4.93 1.64	C
22-1115	Iron Molybdenum Oxide	Fe Mo O4	3.16 6.32 3.52	M
22-0629	Iron Molybdenum Oxide	Fe Mo O4	2.89 2.99 2.95	A
22-0628	Iron Molybdenum Oxide	Fe Mo O4	3.40 6.81 2.27	M

Интерфейс поиска в версии 2013: DDView

The image displays the DDView search interface, which includes a periodic table at the top, a search bar, and several filter panels. The periodic table shows elements H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Ar, and Kr. The search bar contains the text "Potassium Platinum Chloride". The "Author-Defined Space Group (SPGR)" panel is open, showing a list of space groups with "P4/mmm" selected. The "Zeolite Classification" and "Mineral Classification" panels are also visible, showing lists of classifications. The interface is annotated with several text boxes: "Select Elements in Periodic Table" (top left), "Search Example" (top right), "Select Compound Name" (middle right), "Select Author Defined Space Group" (bottom left), and "Selected filters highlighted in red" (bottom center).

Select Elements in Periodic Table

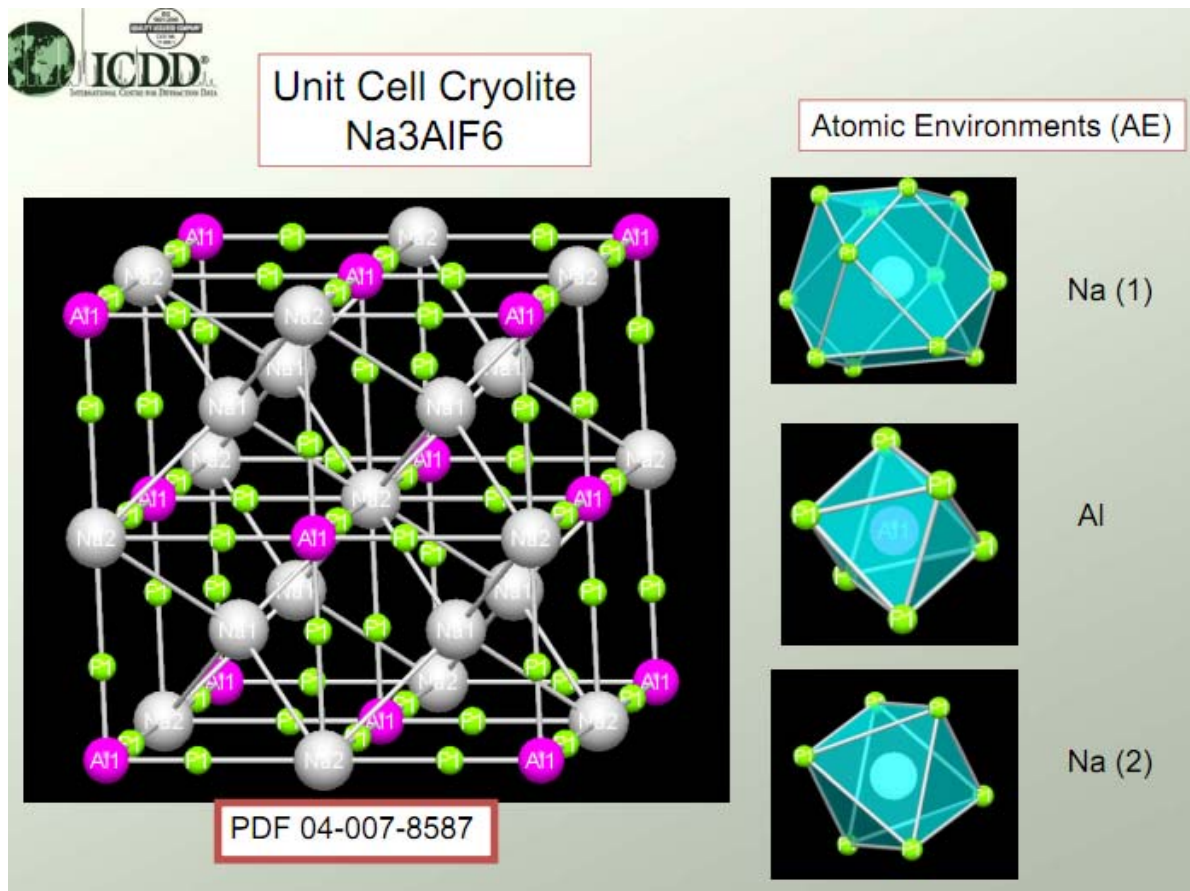
Search Example

Select Compound Name

Select Author Defined Space Group

Selected filters highlighted in red

Новая база данных PDF-4: встроенная программа визуализации структуры



PDF-4 содержит большое число «карточек»,
содержащих СТРУКТУРНЫЕ ДАННЫЕ

Новая база данных PDF-4: возможности

The image displays a screenshot of the PDF4 software interface, which is used for analyzing and visualizing PDF data. The interface is divided into several main sections, each with a red-bordered label:

- View Simulated Electron Spot Pattern:** Shows a simulated electron spot pattern with a grid of spots.
- View Electron Backscattering Pattern:** Shows a simulated electron backscattering pattern with a central bright spot and surrounding rings.
- View Ring Pattern:** Shows a simulated ring pattern with concentric rings.
- View 3D Structure:** Shows a 3D ball-and-stick model of a crystal structure.
- View Bond Distances/Angles:** Shows a table of bond distances and angles for a specific structure.
- View Calculated Digitized Pattern:** Shows a calculated digitized pattern with a plot of intensity versus 2θ .
- View Digital Experimental Patterns:** Shows a digital experimental pattern with a plot of intensity versus 2θ .

In the center of the interface, there is a horizontal bar containing several icons representing different data types and tools, including a 3D structure, a backscattering pattern, a ring pattern, a PDF icon, and a plot. Red dotted lines connect these icons to the corresponding labels.

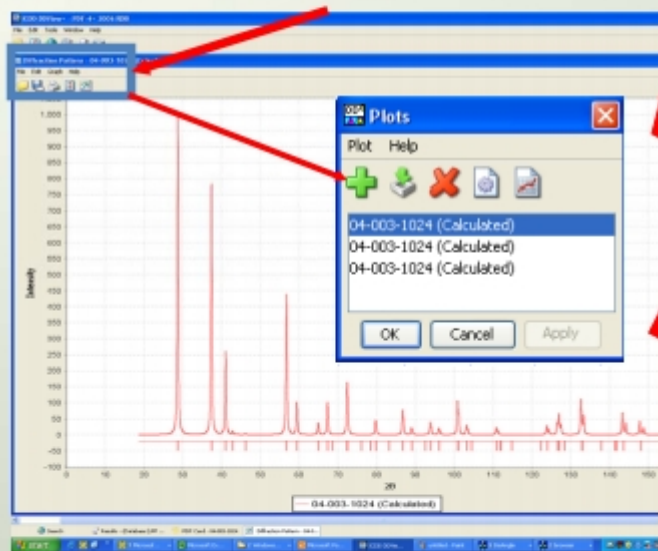
On the right side of the interface, the text "PDF Data Card" is displayed in a large, bold font.

Новая база данных PDF-4: возможности



Pattern Simulations From an Entry

Options for the addition of multiple phases, instrument and specimen factors, wavelengths. Options for import/export and graphic display calculations.



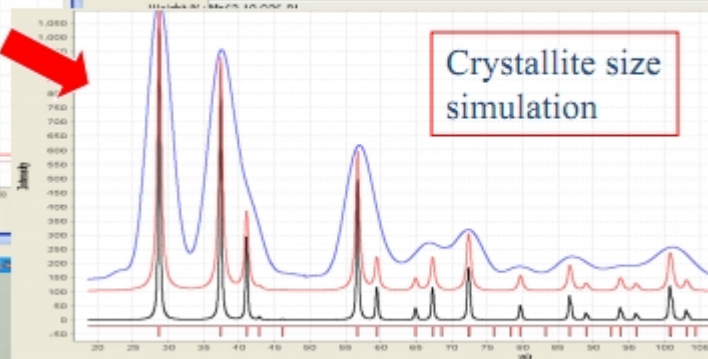
PDF Card - 04-003-1024

File Edit d-Spacings Tools Help

Wavelength: Cu Kα1 1.54056Å

Intensity: Fixed Slt Variable Slt Integrated

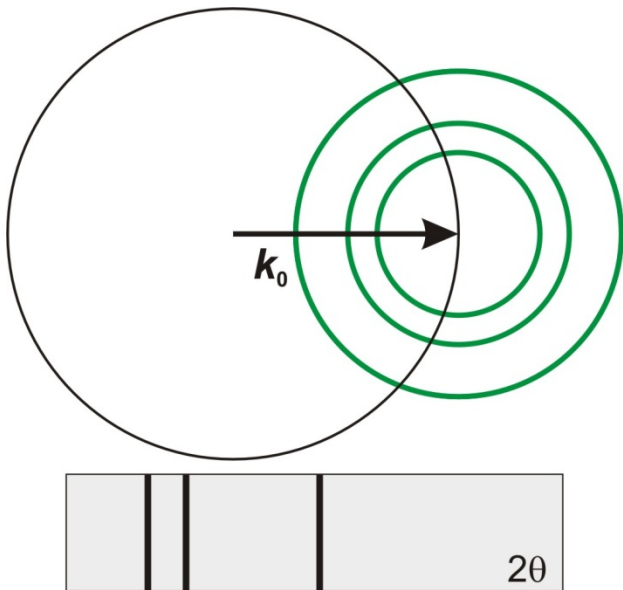
d-spacing	Fixed Slt Intensity	h	k	l
28.6794	3.1101	999	1	0
37.3552	2.4053	490	1	0
41.0058	2.1992	92	2	0
42.8142	2.1104	126	1	1
46.1094	1.967	44	2	1
56.667	1.623	466	2	1
59.3866	1.555	129	2	2
64.8534	1.4365	56	0	2



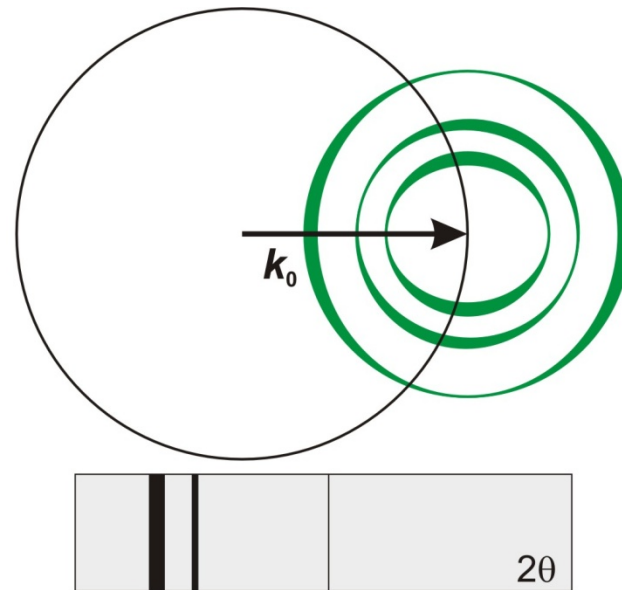
Потенциальная проблема: текстурирование

Текстура – нарушение случайной ориентации кристаллитов в поликристаллической пробе

Текстуры нет

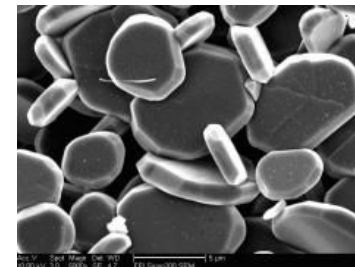
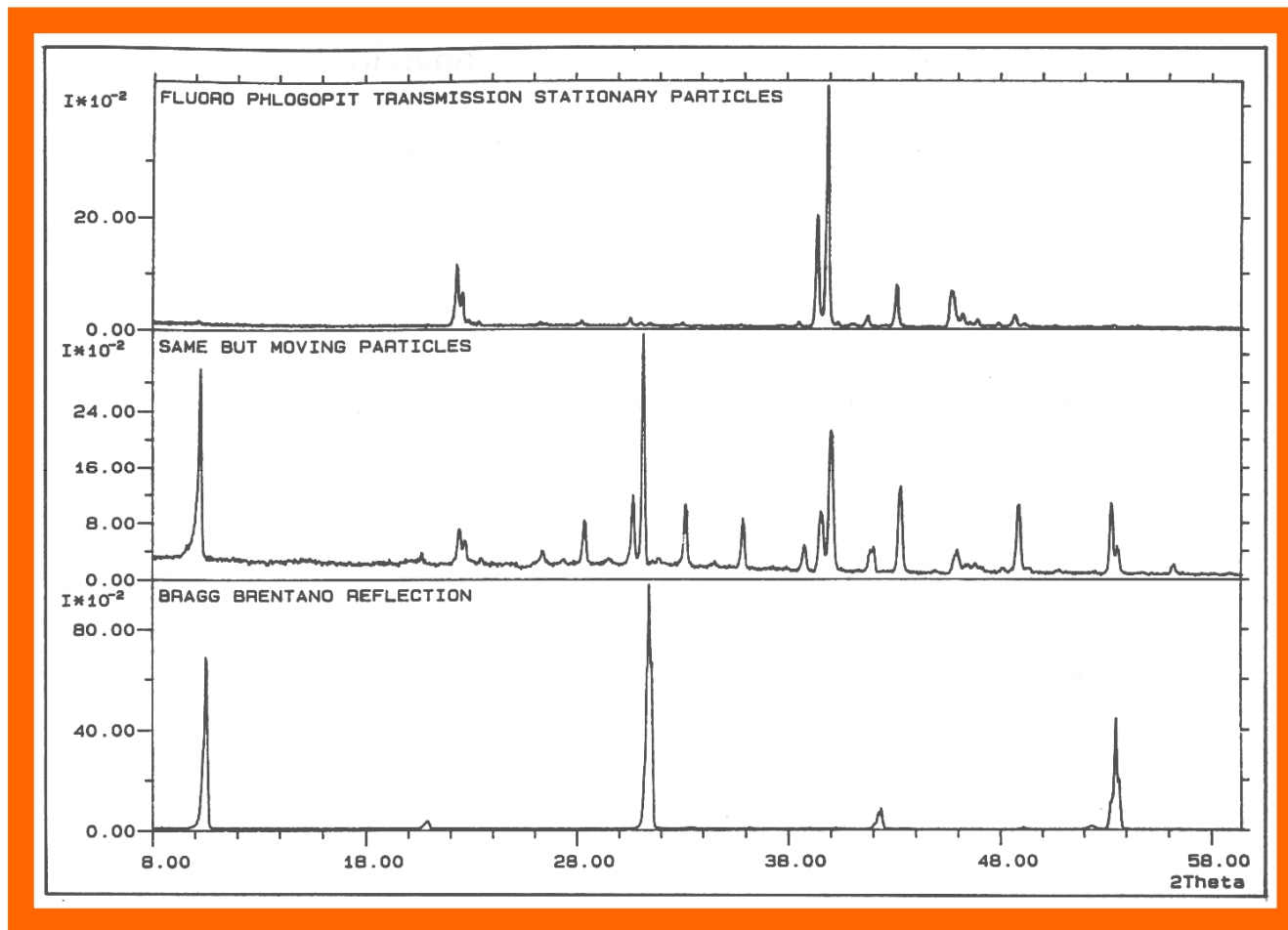


Присутствует текстурирование



Потенциальная проблема: текстурирование

Зависит от геометрии съемки



Приставка вращения образца –
позволяет устранить ОПРЕДЕЛЕННЫЙ ТИП текстуры

Потенциальная проблема 2: неизвестные фазы

"неизвестные" - понимается как "которых нет в базе данных"

вариант: твердый раствор на основе известной фазы

(с измененными значениями параметров элементарной ячейки)

Реализация РФА в WinXPow

Поиск – только по пикам
(необходим предварительный профильный анализ)

Пример:
образец из «QPA round-robin» #1E

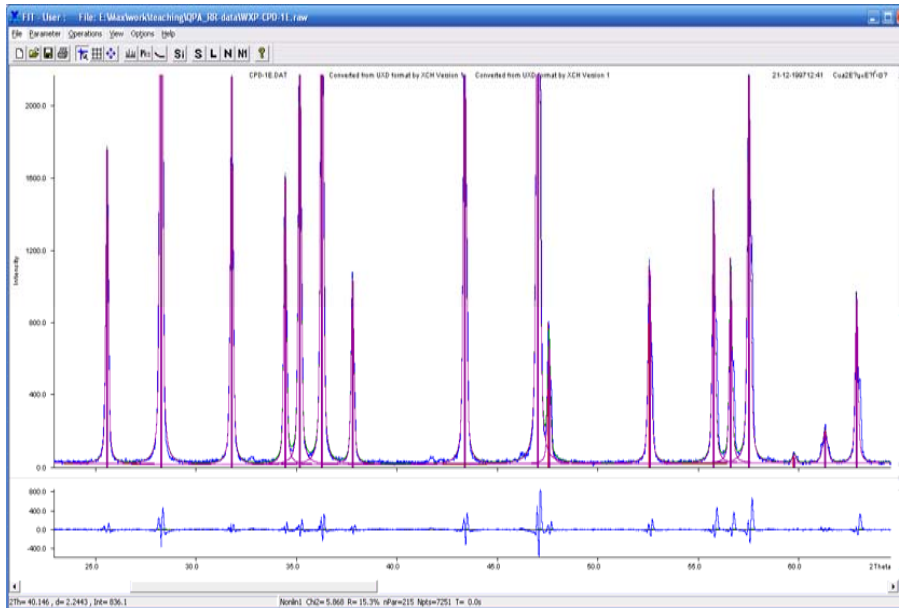
состав

Corundum 55.12%

Fluorite 29.62%

Zincite 15.25%

быстрый тест
(без $\alpha 2$ -stripping)



SEARCH - User : File: E:\Max\work\teaching\QPA_RR-data\RR1E-PEAKS1.pft

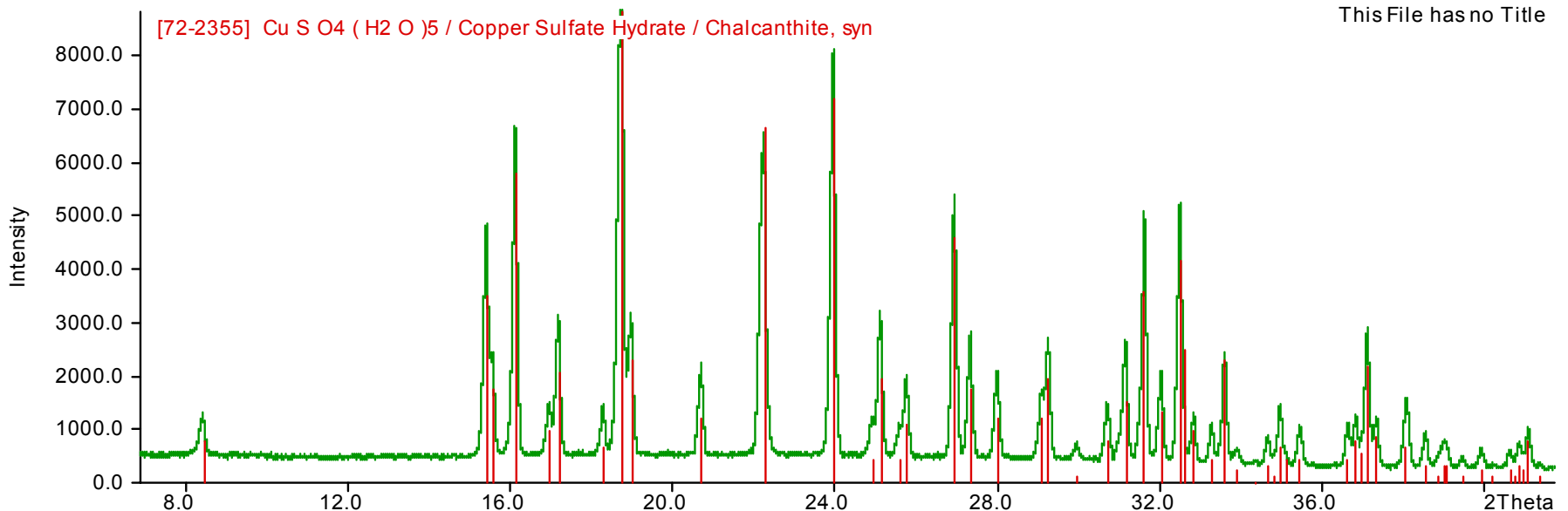
File Select Search View Edit Options Help

N d 2t I F A D * ?

1	[77-2251]	(Ca F2)0.85 (Y F3)0.15 / Calcium Yttrium Fluoride
2	[77-2250]	(Ca F2)0.90 (Y F3)0.10 / Calcium Yttrium Fluoride
3	[77-2245]	Ca F2 / Calcium Fluoride
4	[77-2246]	(Ca F2)0.94 (Y F3)0.06 / Calcium Yttrium Fluoride
5	[77-2248]	(Ca F2)0.75 (Y F3)0.25 / Calcium Yttrium Fluoride
6	[77-2247]	(Ca F2)0.85 (Y F3)0.15 / Calcium Yttrium Fluoride
7	[37-1378]	Y6 Te5 O19.2 / Yttrium Tellurate
8	[77-2249]	(Ca F2)0.68 (Y F3)0.32 / Calcium Yttrium Fluoride
9	[35- 816]	Ca F2 / Calcium Fluoride / Fluorite, syn
10	[48-2115]	C18 H16 N2 O4 Zn / Zinc bis(8-quinolinol) hydroxide
11	[77-2093]	Ca F2 / Calcium Fluoride
12	[77-2094]	Ca F2 / Calcium Fluoride
13	[86-2479]	Sm2 O3 / Samarium Oxide
14	[79-2115]	Sm3 Sb5 O12 / Samarium Antimony Oxide
15	[75-2015]	Pa O2.2 / Protactinium Oxide
16	[75- 206]	H Cl / Hydrogen Chloride
17	[31-1570]	C8 H10 N4 O2 ! H2 O / Caffeine hydrate
18	[79-2205]	Zn O / Zinc Oxide
19	[77-2042]	Na Y F4 / Sodium Yttrium Fluoride
20	[36-1451]	Zn O / Zinc Oxide / Zincite, syn
21	[75- 80]	La1.52 U2.48 O8.9 / Lanthanum Uranium Oxide
22	[43- 158]	Sm3 Sb5 O12 / Samarium Antimony Oxide
23	[77- 379]	Na Si Al O4 / Sodium Aluminum Silicate
24	[75- 132]	Ce.17 U.83 O2 / Cerium Uranium Oxide
25	[74-2432]	U O2.13 / Uranium Oxide
26	[15- 813]	Sm2 O3 / Samarium Oxide
27	[46-1212]	Al2 O3 / Aluminum Oxide / Corundum, syn
28	[77-2041]	Na Er F4 / Sodium Erbium Fluoride
29	[74-1282]	Zr3 O / Zirconium Oxide
30	[75- 154]	Nd.30 Ce.70 O1.85 / Neodymium Cerium Oxide
31	[4- 38]	C6 H11 Ag O2 / Silver caproate
32	[75- 81]	La1.6 U2.4 O8.81 / Lanthanum Uranium Oxide
33	[10- 173]	Al2 O3 / Aluminum Oxide / Corundum, syn
34	[75- 548]	Pr.6 Gd.4 O1.620 / Praseodymium Gadolinium Oxide
35	[46-1968]	C16 H20 Cl N3 ! H Cl / Chloropyramine hydrochloride
36	[78- 402]	Nd.5 Pa.5 O2 / Neodymium Protactinium Oxide
37	[33-1813]	C8 H12 N2 ! H2 S O4 / 2-Phenylethyl-hydrazine sulfate
38	[78- 418]	Am.5 Pa.5 O2 / Americium Protactinium Oxide
39	[18-1895]	C6 H6 Ag O3 P / Silver phenyl phosphonate
40	[82- 255]	Y Ba2 Cu3 O6.35 / Yttrium Barium Copper Oxide

Практические аспекты

Финальная стадия поиска – визуальный анализ соответствия
«стандарт – эксперимент»



Критерии соответствия:

- 1. Все линии стандарта должны присутствовать на экспериментальной дифрактограмме**
- 2. Соотношение интенсивностей ?**
- 3. Качество стандарта – *, I, C**
- 4. Химический состав «образец/стандарт»**

Тем не менее

- 1) качественный анализ сложных многокомпонентных образцов - по-прежнему очень трудоемкая и не всегда однозначно решаемая задача
- 2) желательны независимые данные о хим. составе (РСМА или аналог.)
- 3) необходимо тщательная подготовка образца для минимизации текстуры

