

Качественный и количественный фазовый анализ по базе COD

Программа «Качественный и количественный фазовый анализ по базе COD» предназначена для идентификации кристаллических фаз по порошковым рентгенограммам и для определения их содержания в смесях.

Программа имеет встроенную базу эталонных рентгенограмм (более 20 тыс.), рассчитанных по структурным данным, находящимся в свободном доступе в базе Crystallography Open Database по адресу www.crystallography.net.

Пользователь имеет возможность пополнять базу данных программы нужными ему эталонами как при помощи загрузки CIF-файлов из любых структурных баз (COD, AMC-SD, ICSD и пр.), так и путем создания нового CIF-файла либо редактирования структурных данных в уже загруженных CIF-файлах.

Идентификация фаз происходит путем поиска по встроенной базе, выбора наилучшего совпадения с эталонной рентгенограммой и сопоставления по двум критериям (углового положения линий и их интенсивностей).

При расчете концентраций компонентов в смеси возможен учет преимущественной ориентации частиц индивидуально для каждого компонента в случае, если интенсивности пиков данного компонента на экспериментальной и рассчитанной рентгенограмме сильно отличаются при хорошем совпадении их угловых положений.

Предоставляется возможность индивидуального уточнения ПЭЯ компонентов в случае, если наблюдаются небольшие отклонения угловых положений пиков.

Также возможно загрузить измеренную рентгенограмму и для сравнения смоделировать рентгенограмму, задав средние размеры кристаллитов для каждой из найденных фаз и взяв их в найденных концентрациях. При этом рассчитанная и экспериментальные рентгенограммы масштабируются для удобства сравнения.

Программа позволяет анализировать рентгенограммы, измеренные на дифрактометрах ДРОН-8(8Т), ДРОН-7(7М) и настольном аппарате Колибри, а также на выпускавшихся ранее моделях ДРОН-6 и ДРОН-4.



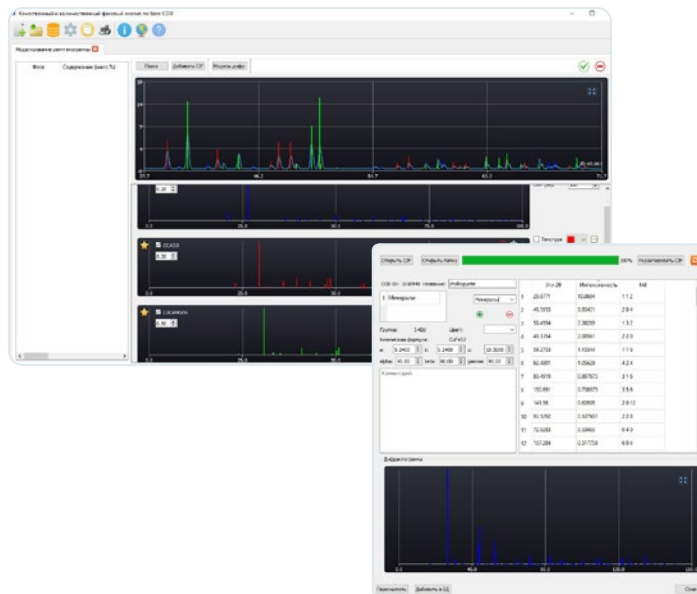
Основные функциональные возможности программы

Поиск и выбор структурных данных по установленным критериям

Загрузка файлов структурных данных в формате *.cif с возможностью просмотра и редактирования используемых при расчете параметров

Расчет порошковой рентгенограммы по загруженным данным в указанном угловом диапазоне и для указанной длины волны, в том числе для дуплетов и синглетов

Расчет рентгенограмм смесей с указанными концентрациями компонентов и с указанным размером кристаллитов для каждого компонента, а также с учетом преимущественной ориентации частиц в заданном кристаллографическом направлении



Встроенная база рассчитанных рентгенограмм стандартов (более 20 тыс.)

Организация пользовательских подбаз рассчитанных рентгенограмм, как из стандартов основной базы, так и непосредственно из базы COD

Выбор стандартов из встроенной базы по указанному набору химических элементов

Графическая визуализация измеренных данных, сравнение экспериментальных и рассчитанных спектров

Функция масштабирования интенсивности и вычитания фона для экспериментальных данных при сравнении с рассчитанной рентгенограммой

Качественный фазовый анализ образцов

Установка требуемых критериев поиска (ограничение по элементному или минеральному составу, ограничение по ошибке углового положения и/или по числу совпавших линий, автовыбор наилучшего решения, фиксирование найденных решений с возможностью их исключения из дальнейшего поиска при большом количестве компонентов смеси)

Количественный фазовый анализ, в том числе при наличии текстуры у одного или нескольких компонентов

Уточнение параметров элементарной ячейки и текстурных коэффициентов индивидуально для каждого компонента в анализируемой смеси (при необходимости) для получения наилучшего результата

Установка диапазона уточнения ПЭЯ

Формирование отчета одной кнопкой

Двуязычный интерфейс, встроенная двуязычная хелп-система и всплывающие подсказки