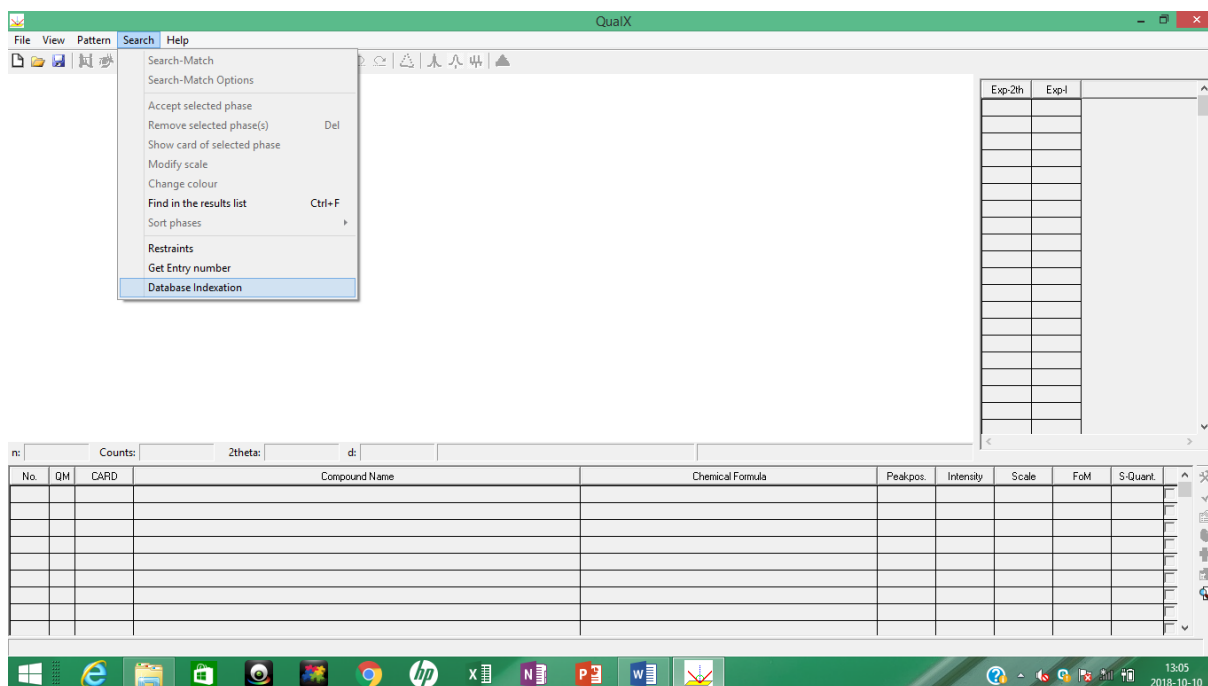


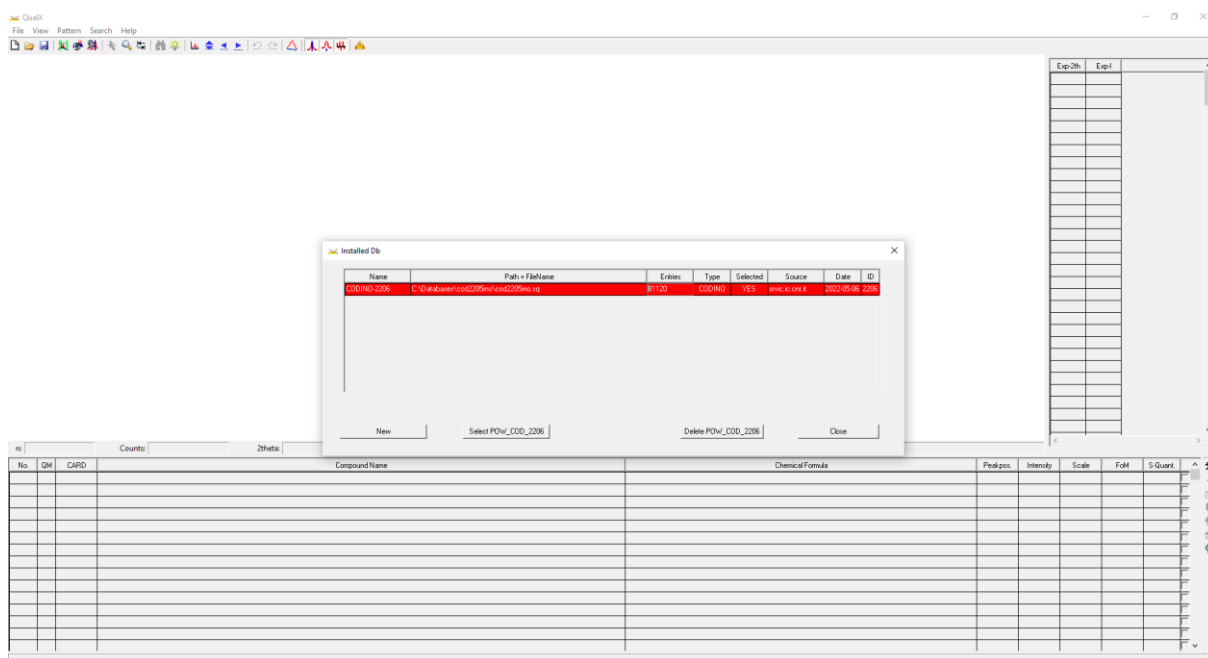
Michał Duda

Analiza fazowa przy użyciu programu QualX – instrukcja

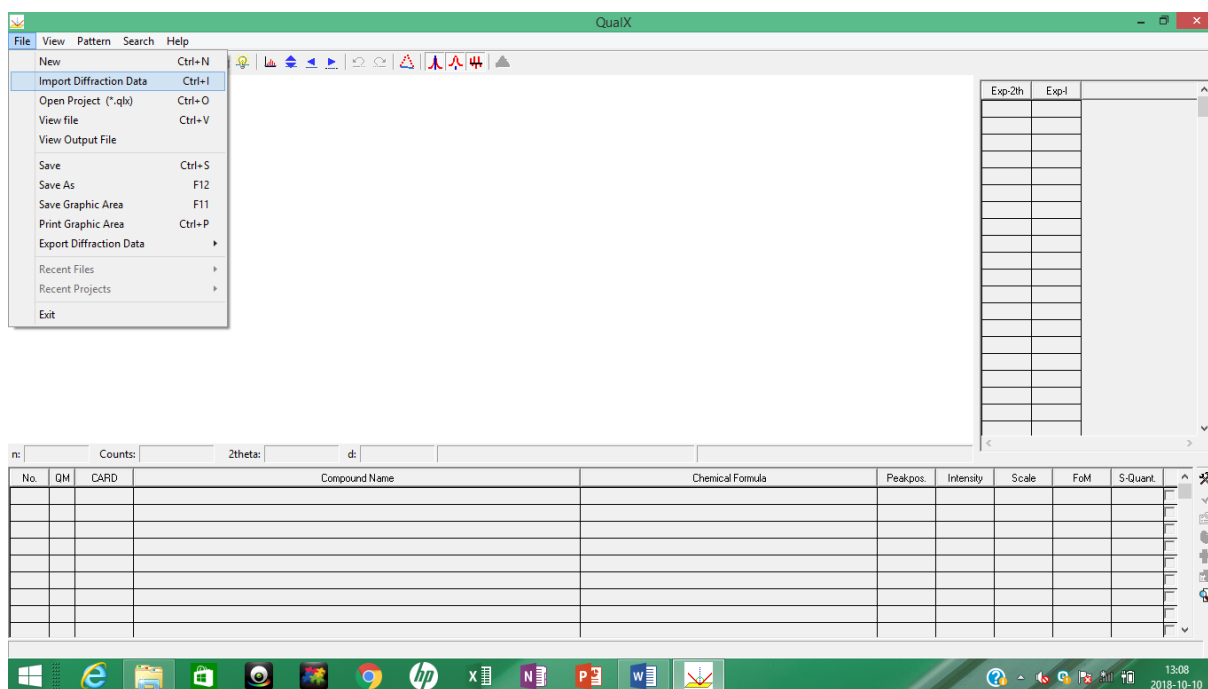
1. Otworzyć QualX klikając na odpowiednią ikonkę na pulpicie
2. Search -> Database Indexation



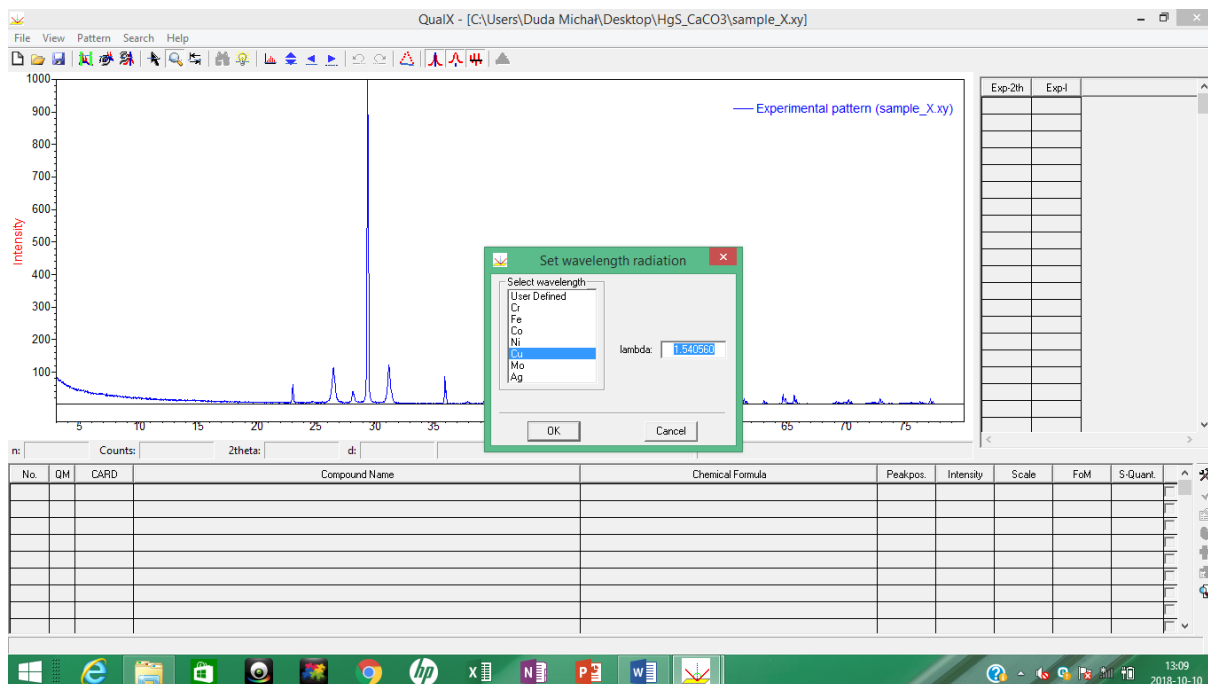
3. New -> Wybrać bazę zainstalowaną na komputerze. Kliknąć na wiersz z wypisaną bazą; wtedy ten wiersz podświetli się na czerwono. Select POW_COD_2206



4. **Close**. Wprowadzić dane dyfrakcyjne (w formacie .xy): **File** -> **Import Diffraction Data**

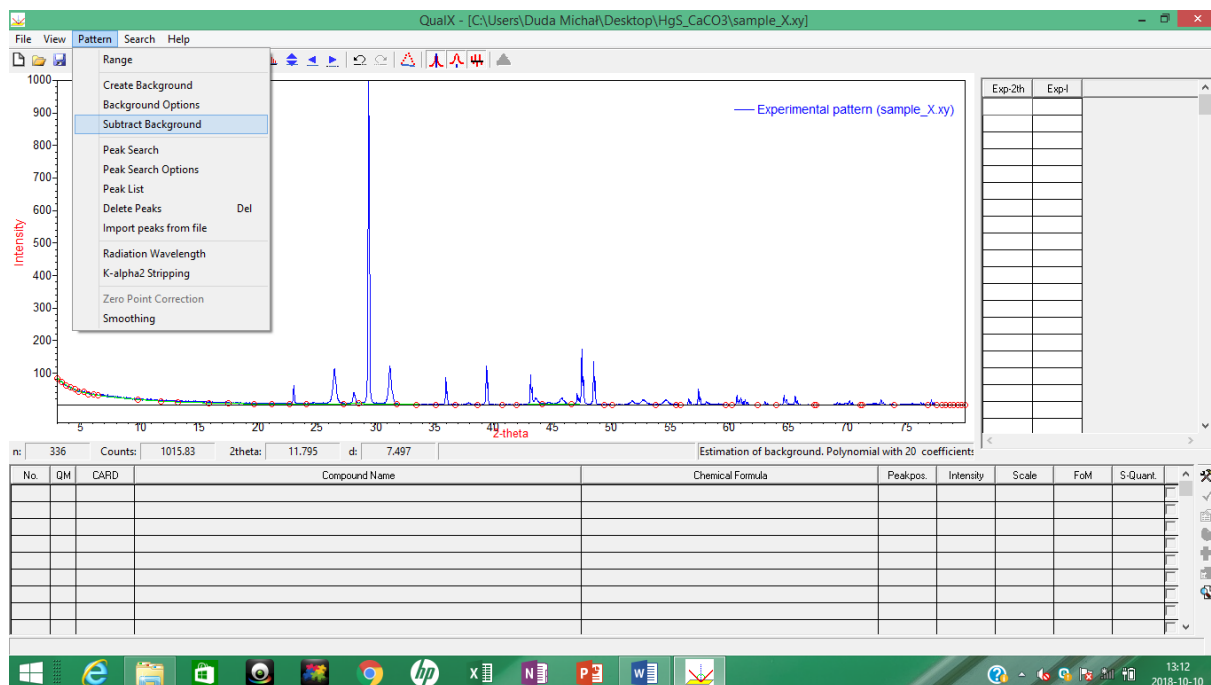


5. Po wybraniu pliku pojawia się dyfraktogram; należy wybrać długość fali promieniowania (promieniowanie Cu)



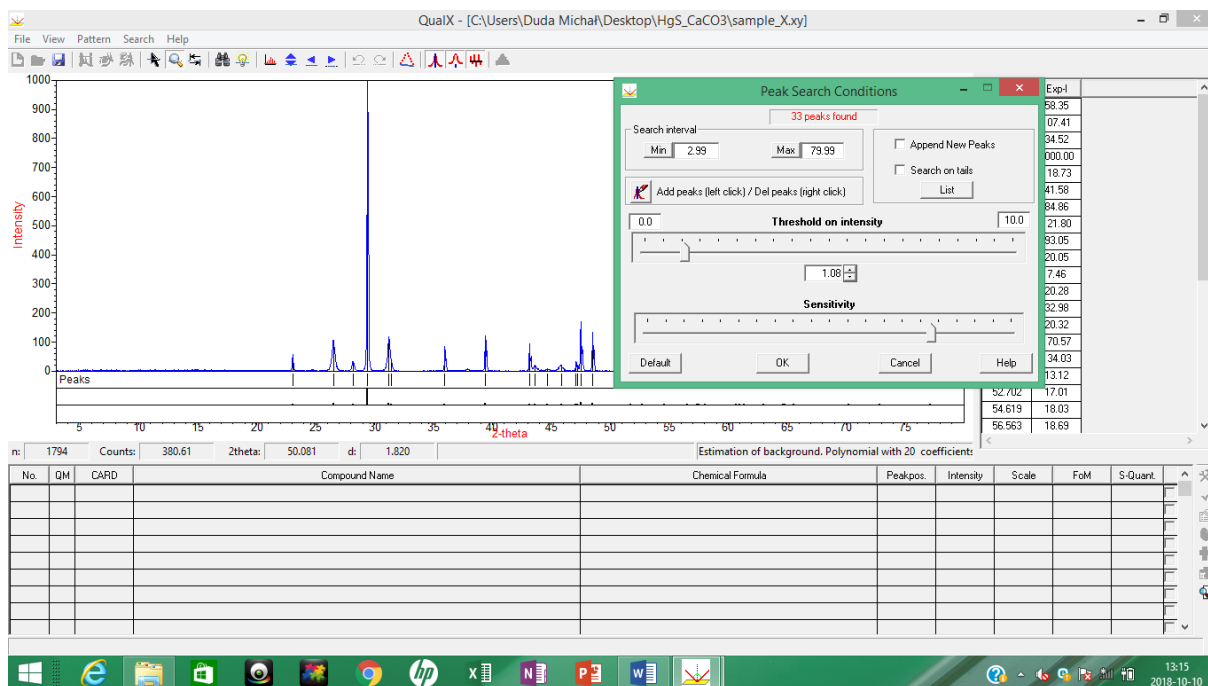
The screenshot shows the QualX software window titled "QualX - [C:\Users\Duda Michał\Desktop\HgS_CaCO3\sample_X.xy]". The main area displays an X-ray diffraction (XRD) pattern plot with "Intensity" on the y-axis (0 to 1000) and " 2θ " on the x-axis (5 to 75 degrees). A blue line represents the experimental pattern. A context menu is open over the plot, listing options such as "Range", "Create Background", "Background Options", "Peak Search", "Peak List", "Delete Peaks", "Import peaks from file", "Radiation Wavelength", "K-alpha₂ Stripping", "Zero Point Correction", and "Smoothing". Below the plot, status information is displayed: "n: 474", "Counts: 999.48", " 2θ : 15.406", and " d : 5.747". At the bottom, there are two tables. The first table has columns: No., QM, CARD, Compound Name, Chemical Formula, Peakpos., Intensity, Scale, FoM, and S-Quant. The second table has columns: Exp-2th and Exp-I. The Windows taskbar at the very bottom shows various application icons and the system clock indicating 13:10 on 2018-10-10.

7. **Pattern** -> **Subtract Background**

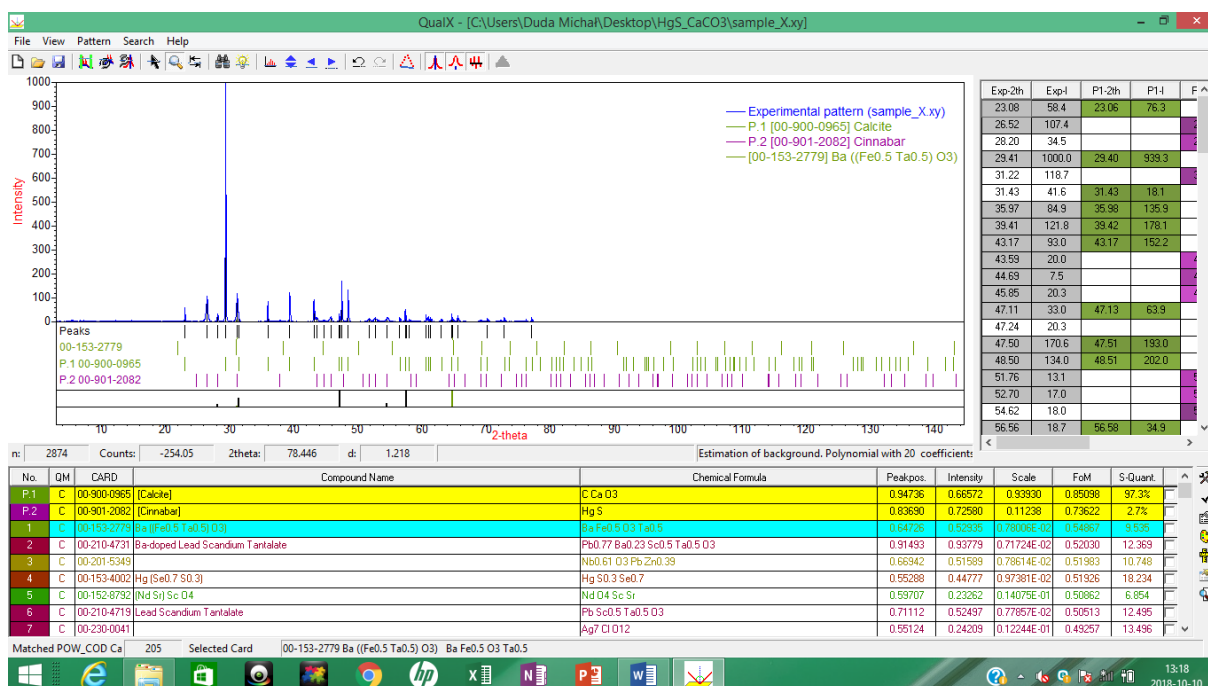


[illegible]

The screenshot displays the QualX software interface. The main window shows an XRD pattern with Intensity on the y-axis (0 to 1000) and 2-theta on the x-axis (5 to 75 degrees). A prominent peak is visible at approximately 30 degrees 2-theta. A context menu is open over the pattern, listing options such as Range, Create Background, Background Options, Subtract Background, Peak Search, Peak Search Options (highlighted), Peak List, Delete Peaks, Import peaks from file, Radiation Wavelength, K-alpha2 Stripping, Zero Point Correction, and Smoothing. Below the pattern, a table lists peak data with columns for No., QM, CARD, Compound Name, Chemical Formula, Peakpos, Intensity, Scale, FoM, and S-Quant. The table is currently empty. The bottom status bar shows the file path: C:\Users\Michal\Desktop\Hg_S_CaCO3\sample_X.xy.



9. Po naciśnięciu ikony lornetki na znajdującym się u góry pasku narzędzi znajduwane są fazy krystaliczne. Fazy te wylistowane są w tabeli poniżej dyfraktogramu. Fazy, które akceptujemy, należy zaznaczyć znakiem „ptaszka” po prawej stronie listy faz. Pojawią się wtedy procentowe zawartości faz, a dany wiersz w tabeli podświetli się na żółto



Najeżdżając na ikonkę pod „ptaszkiem” („ręka trzymająca kartkę”) uzyskuje się adres internetowy, pod którym można znaleźć cifa odpowiadającego danej fazie, numer karty w bazie COD oraz podstawowe dane krystalograficzne i odnośnik literaturowy

