



昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

X射线粉末衍射技术

—Jade数据处理原理与基本操作

昆明理工大学分析测试研究中心
云南省分析测试中心

王春建
2017年11月

科学 公正 准确 高效





说明:

课件中的图很多来自于网络课件或公开文献，在此特向图表原作者致敬。



科学 公正 准确 高效





XRD图谱处理软件

- * Jade
- * Highscore
- * PCPDGWin
- * Searchmatch
- * Powder X
- * Celref

Livermore, California, USA
MDI公司Jade



科学 公正 准确 高效





昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

Jade



科学 公正 准确 高效





1. 图谱数据基本处理
2. 自动检索物相，简易定量分析
3. 衍射峰指标化
4. 晶胞参数计算
5. 衍射峰位置校正
6. 图谱精修
7. 图谱模拟计算
8. 出图更方便，可在图上自由编辑

.....

Jade功能



科学 公正 准确 高效





昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan



www.materialsdata.com 购买下载Jade



Micro-XRF / Microprobe Analysis Search

Time-of-Flight (TOF) Neutron Diffraction Data

Plotting Options

www.icdd.com 购买下载PDF-2\PDF-4

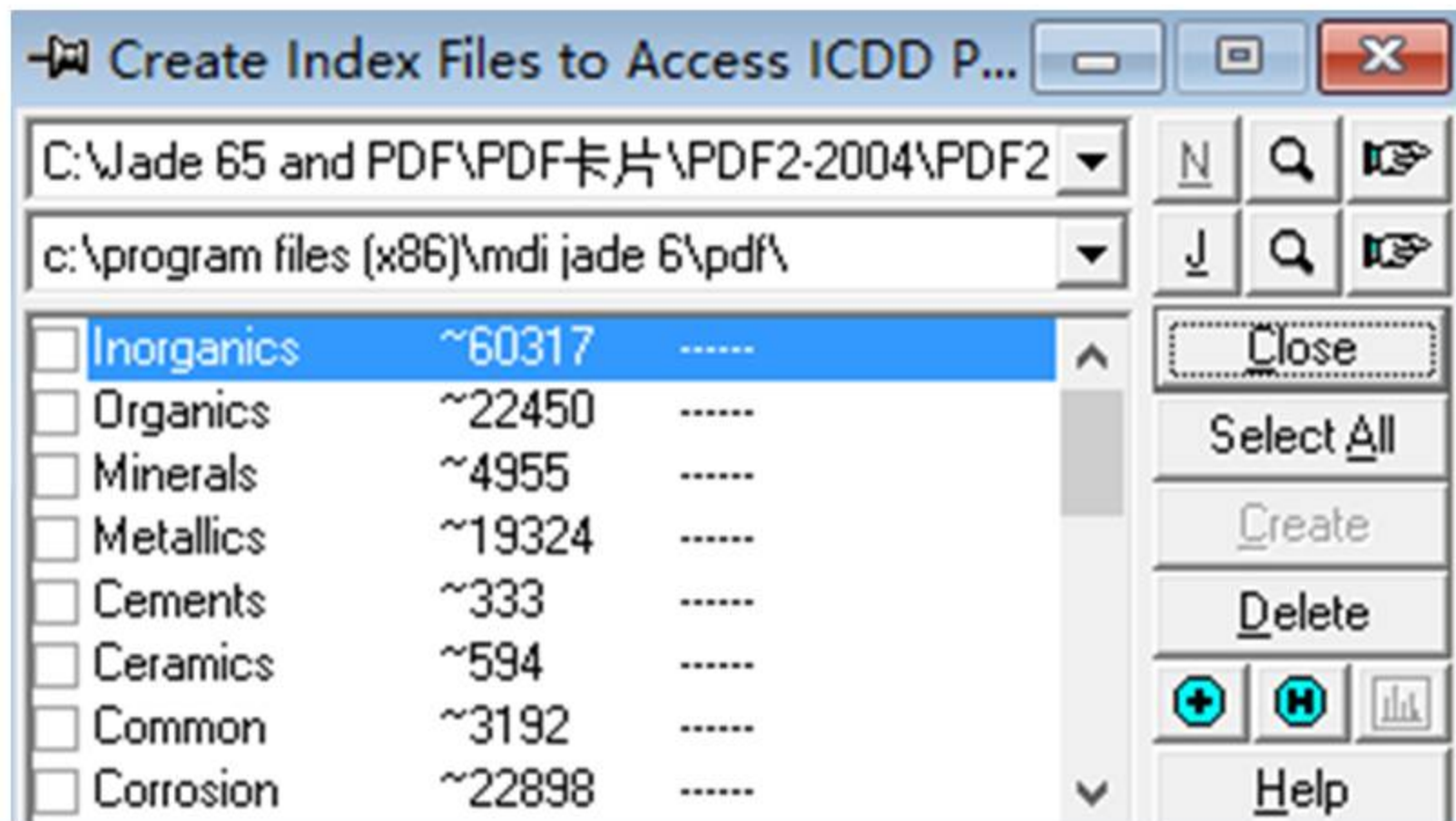
安装软件、链接数据库

科学 公正 准确 高效





Jade--PDF--Setup





图谱数据的一般处理

数据读入

数据平滑

本底扣除

$K\alpha$ 2扣除

寻峰

分峰拟合

其他（显示、平移、缩放、叠放.....）

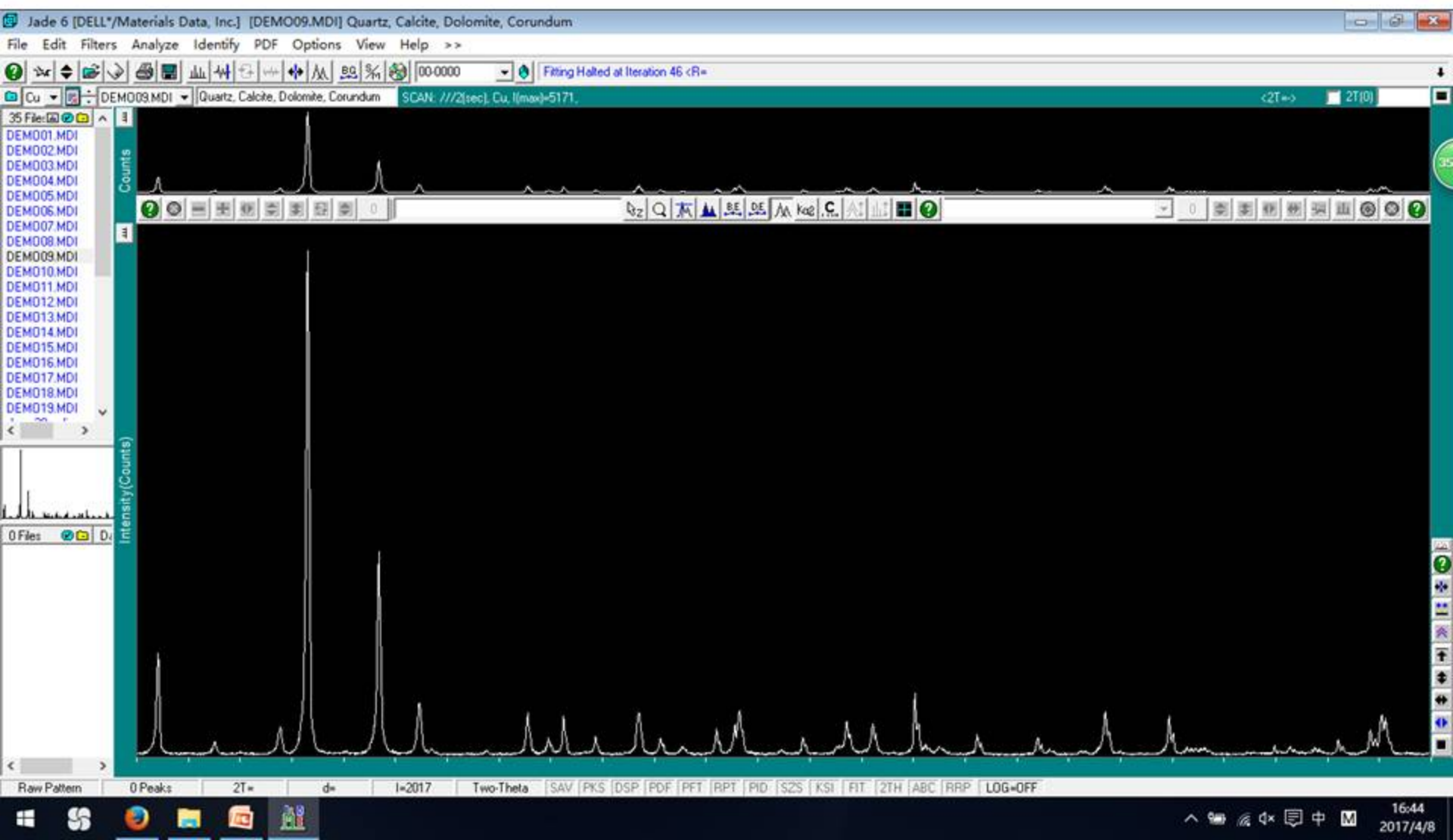


科学 公正 准确 高效





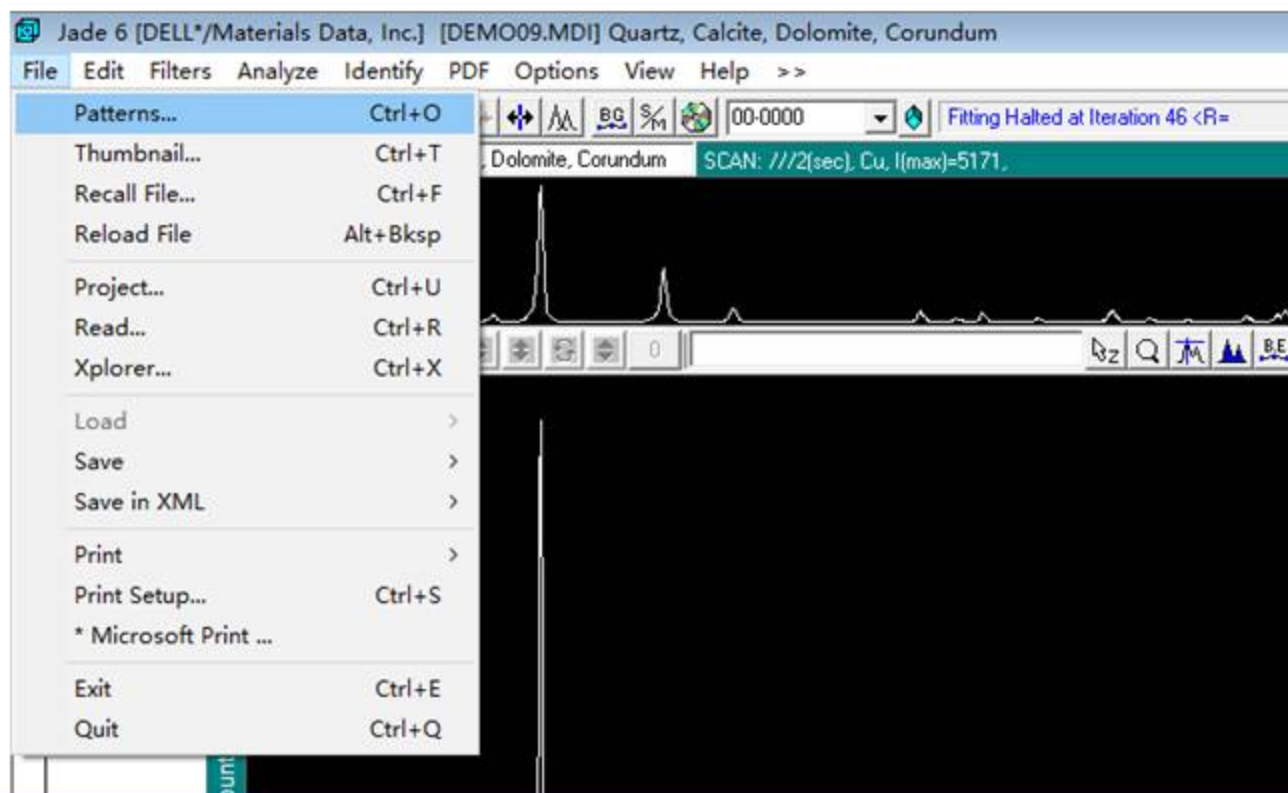
Jade主界面





图谱读入

点击菜单“file | patterns”





Read Pattern Files (Today=1, Week=13, Month=13, Year=13)

Close **Read** Add Macro Select All Browse **Refresh** Filter... Import... Print Save Copy Help

N d:\实验\试验数据及图表\XRD*.txt X JADE Ascii Import Pattern Files (*.txt)

d: [DOWNLOAD] ☒ ☐ ☒ CPS ☒ ☒ Scan ID

选择数据所在的位置

d:\
实验
试验数据及图表
XRD

选择相应的格式

- XRD Pattern Files (*.*)
- MDI Ascii Pattern Files (*.mdi)
- JADE Ascii Pattern Files (*.dif)
- JADE Background Curves (*.bkg)
- JADE Binary Pattern Files (*.bin)
- JADE Ascii Import Pattern Files (*.txt)**
- MDI Databox Dump Pattern Files (*.dbx)
- MDI SHADOW Ascii Pattern Files (*.xda)

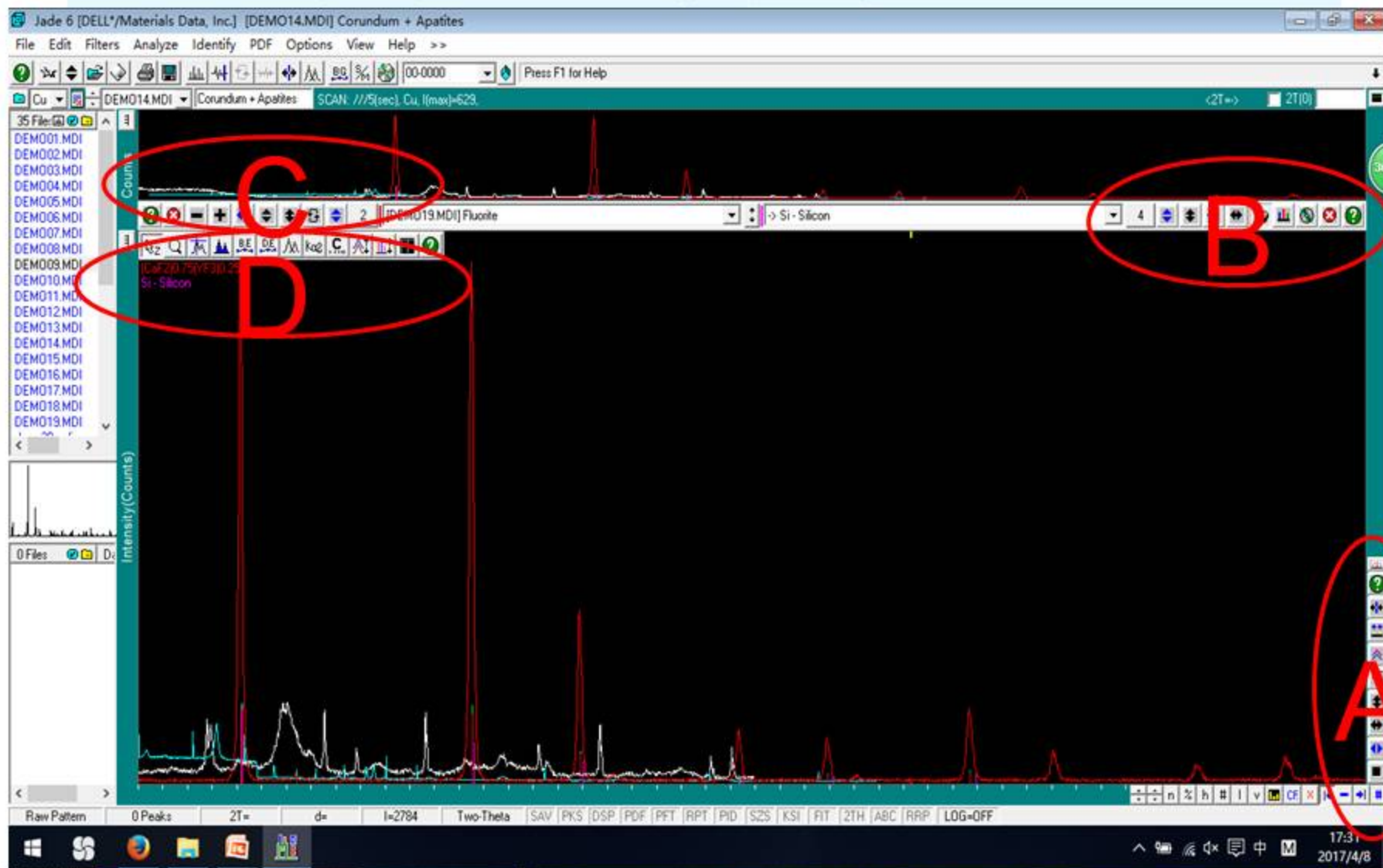
File Name	Scan ID	File ID	Size	Date
zqt-7.txt	(Unable to Read File ID)			
zqt-y2.txt	(Unable to Read File ID)			
zqt-y1p.txt	(Unable to Read File ID)			
zqt-y2p.txt	(Unable to Read File ID)			
zqt-y3.txt	(Unable to Read File ID)			
zqt-y3p.txt	(Unable to Read File ID)			
zqt-62.txt	(Unable to Read File ID)		66KB	05-26-05 10:50
zqt-63.txt	(Unable to Read File ID)		66KB	05-26-05 10:52
zqt-y1.txt	(Unable to Read File ID)		186KB	05-26-05 09:00
zqt-63p.txt	(Unable to Read File ID)		6KB	05-26-05 08:59
zqt-62p.txt	(Unable to Read File ID)		5KB	05-26-05 08:58
zqt-19p.txt	(Unable to Read File ID)		7KB	05-26-05 08:56
zqt-19.txt	(Unable to Read File ID)		186KB	05-26-05 08:56

选中要导入的数据文件

19 Files Sorted on Scan ID SAV PKS DSP PDF PFT RPT PID SZS KSI FIT SRM ABC RIR JSM

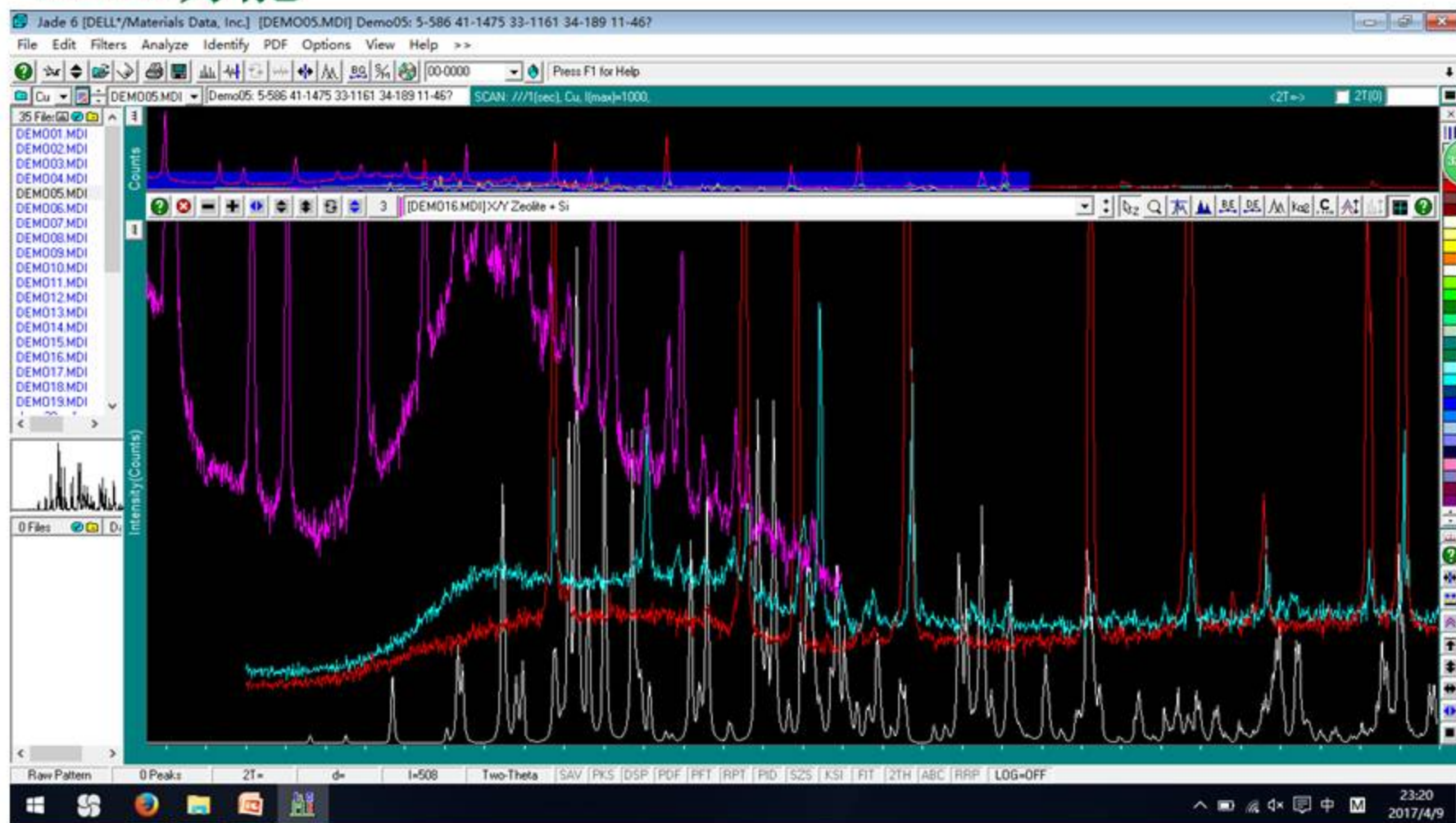
P/N=6.0







Add功能

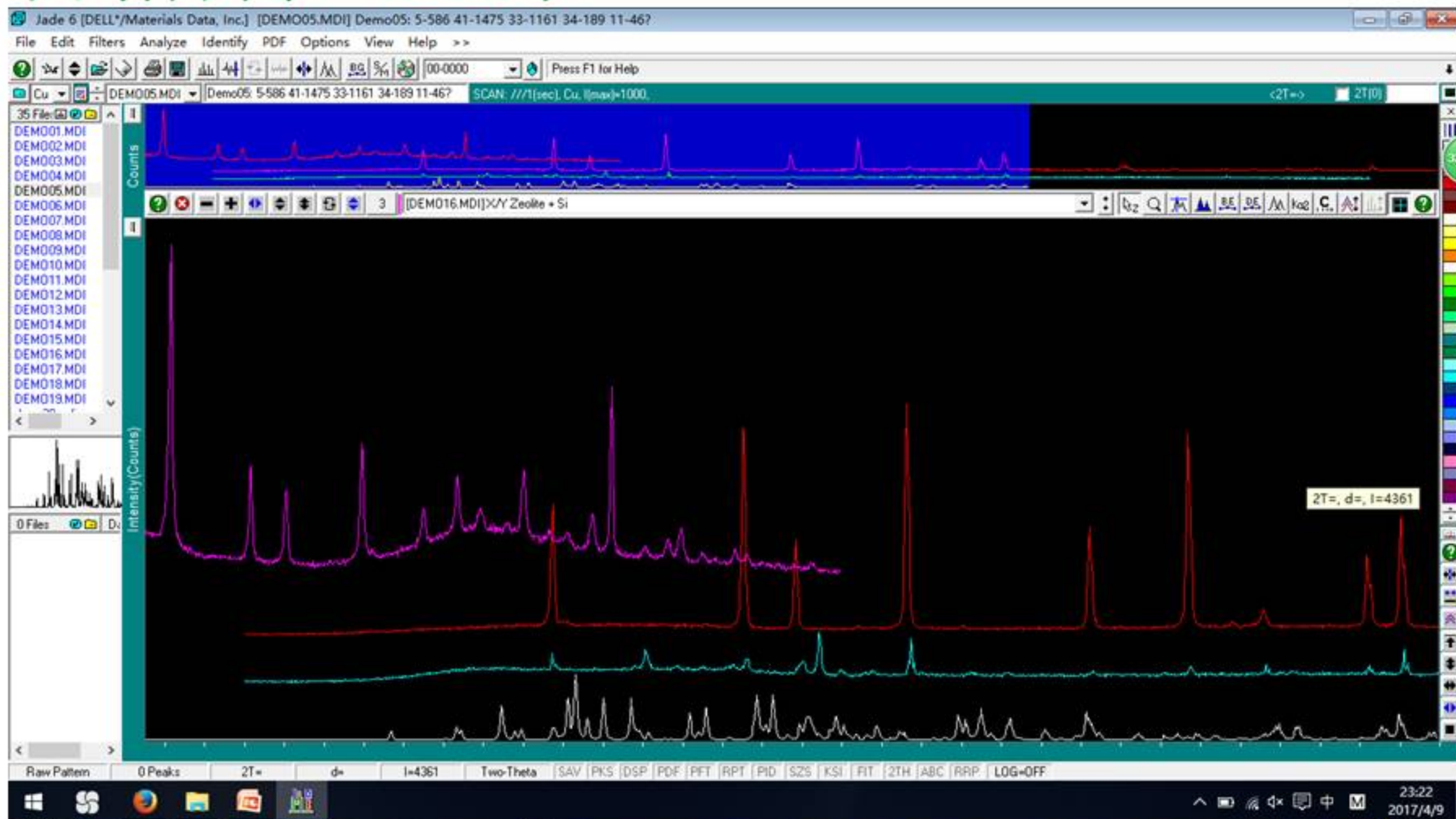


科学 公正 准确 高效



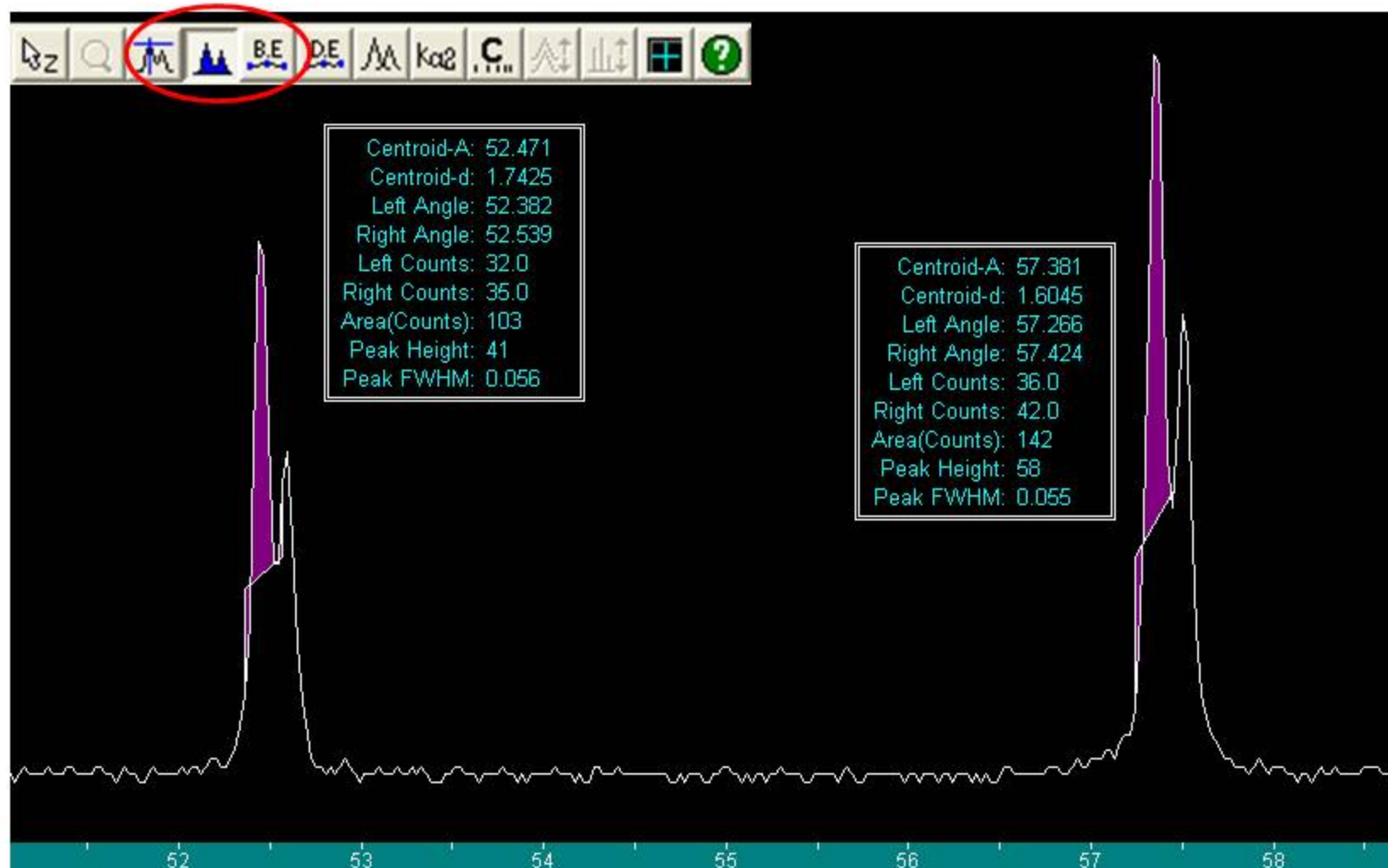


图谱分离、全显示



科学 公正 准确 高效



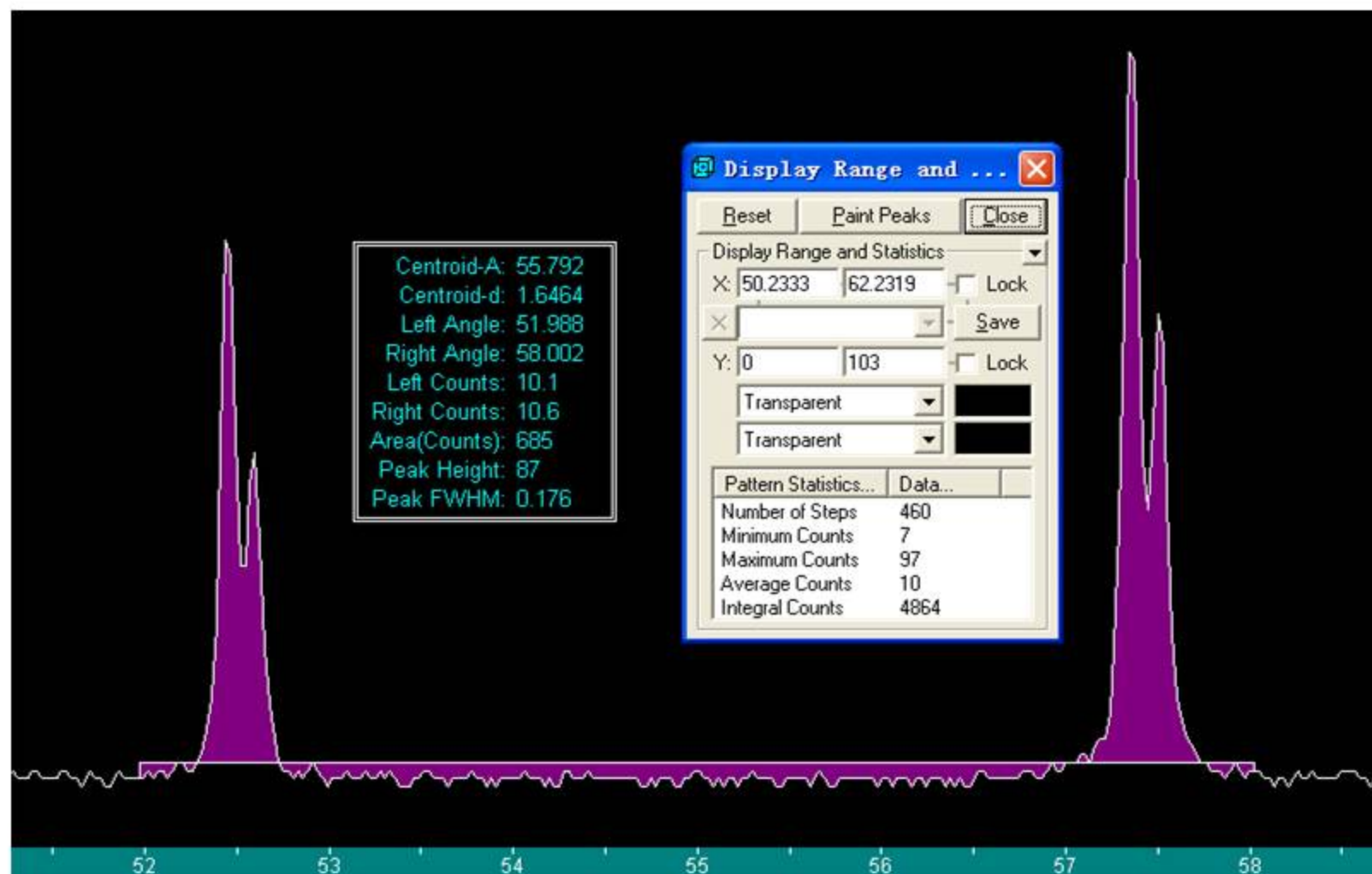


手动峰渲染



科学 公正 准确 高效





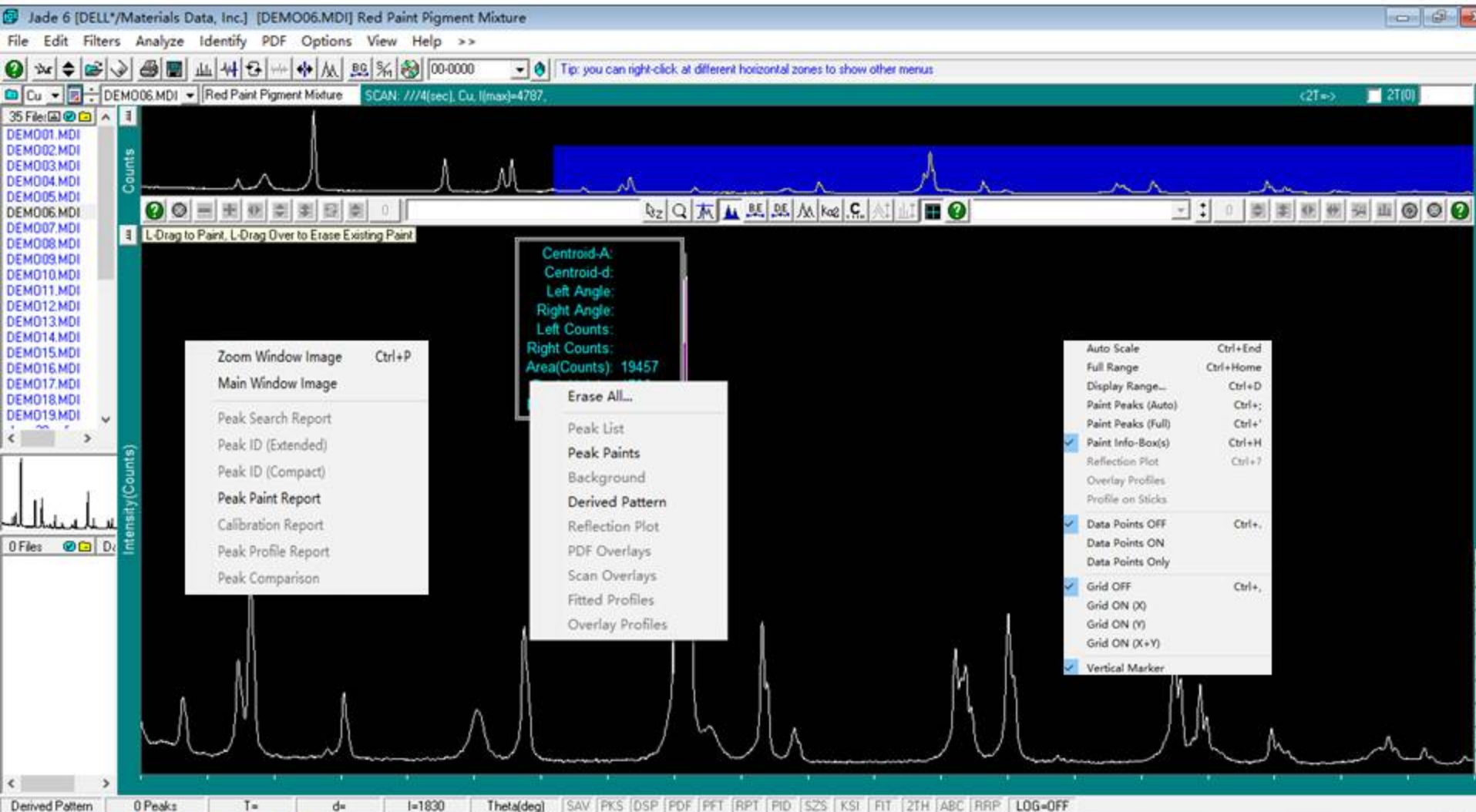
定量峰渲染

科学 公正 准确 高效





右键不同功能





昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

寻峰 FIND PEAKS

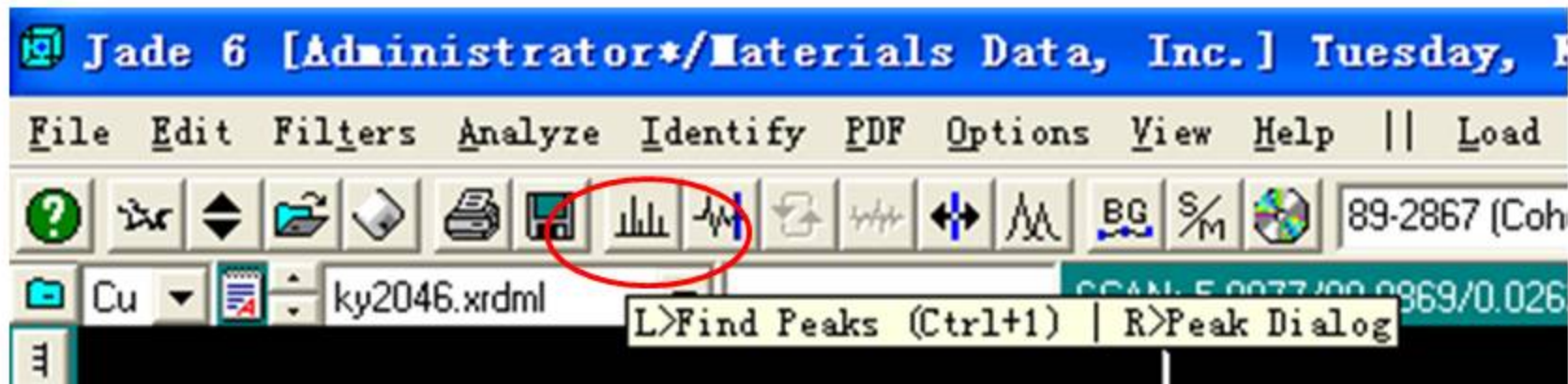


科学 公正 准确 高效





寻峰 (Find Peaks)



手动峰编辑 (Peak Editing Cursor)



科学 公正 准确 高效

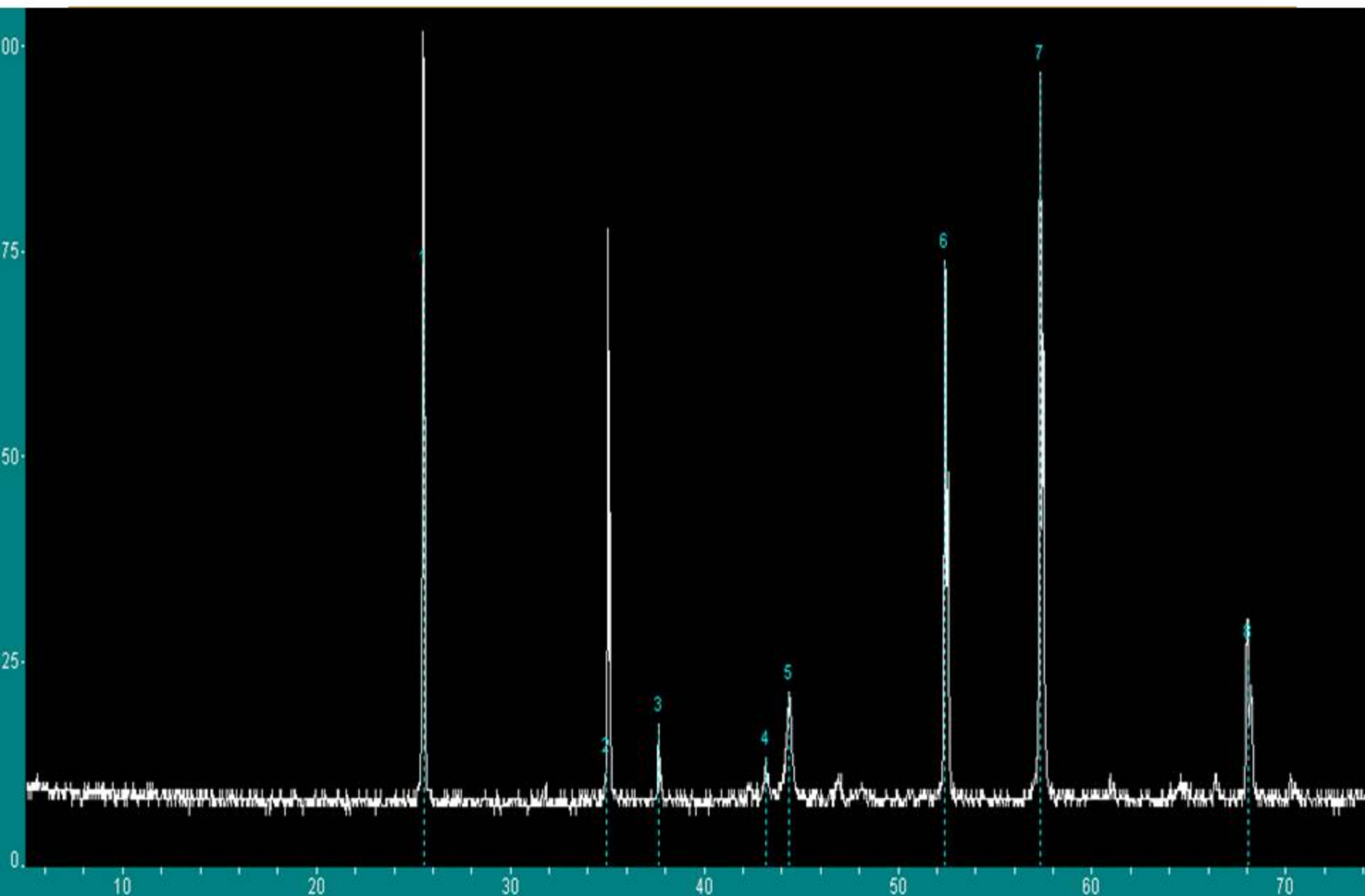




昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan





Labeling

Peak Search, Labeling & Scaling

Search **Labeling** Peak ID... Report... Threshold ?

Peak Labeling and Scaling:

☒ Line Marker	☐ FWHM
☐ d-Spacing	☐ Peak-#
☐ 2-Theta	☐ hkl Indices
☐ Intensity%	☒ Peak Height
☐ Raw Counts	☐ Peak Area
☐ P/N	☐ Asterisk

d-Spacing Unit: ☒ Angstrom(?) ☐ (nm)

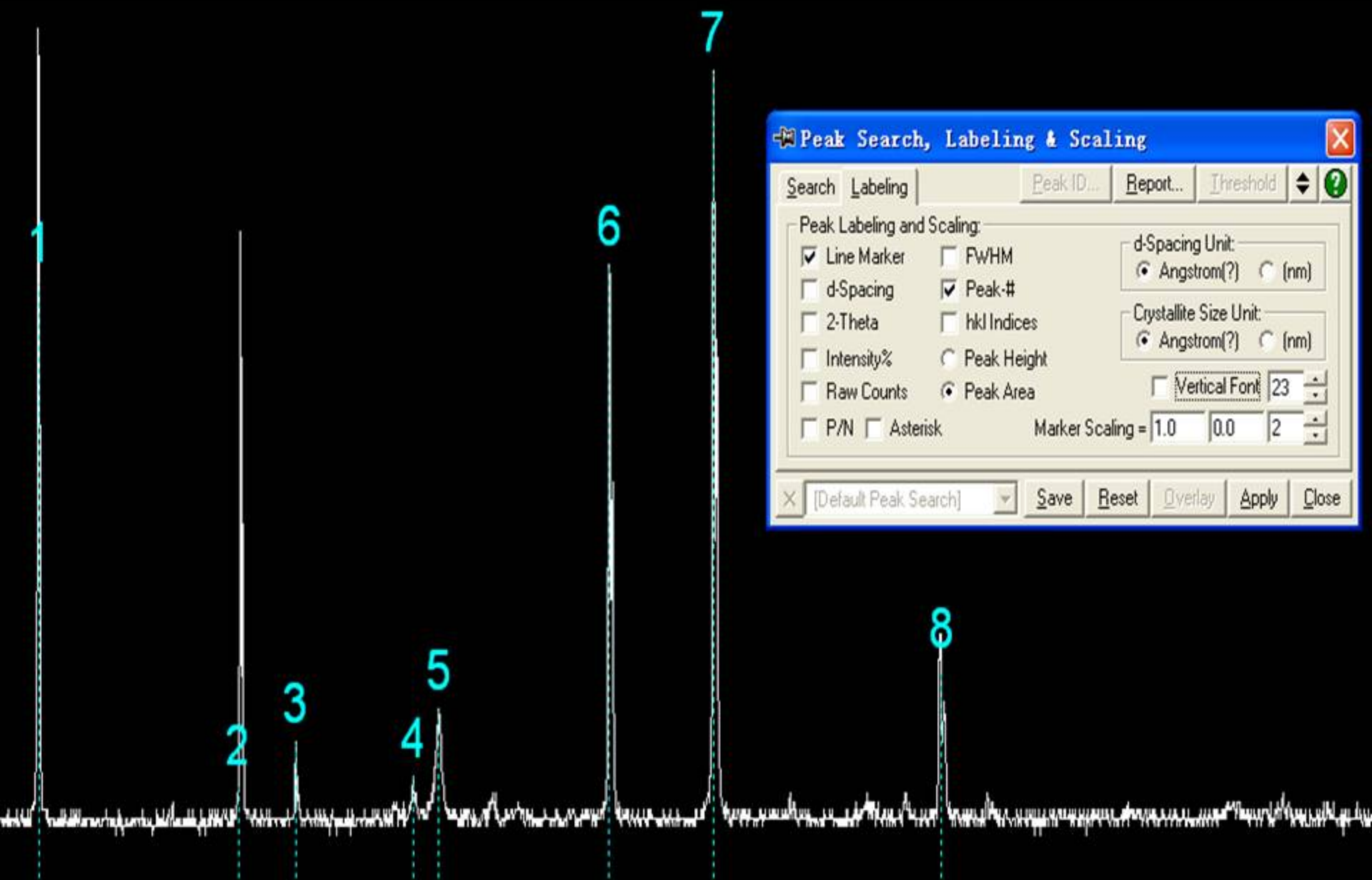
Crystallite Size Unit: ☒ Angstrom(?) ☐ (nm)

☐ Vertical Font 8

Marker Scaling = 2

[X] [Default Peak Search] Save Reset Overlay Apply Close







昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



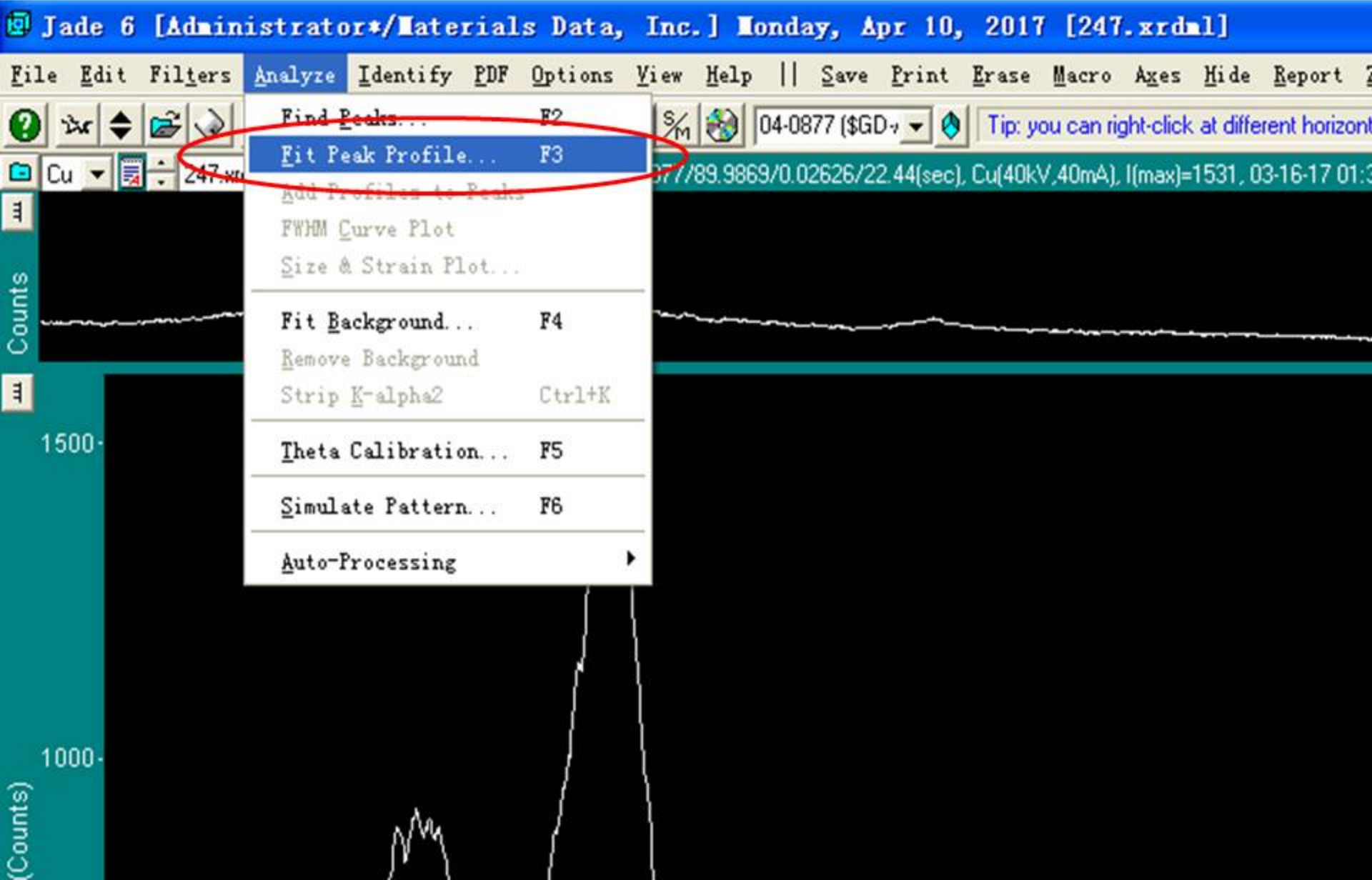
云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

峰形拟合 FIT PROFILES



科学 公正 准确 高效

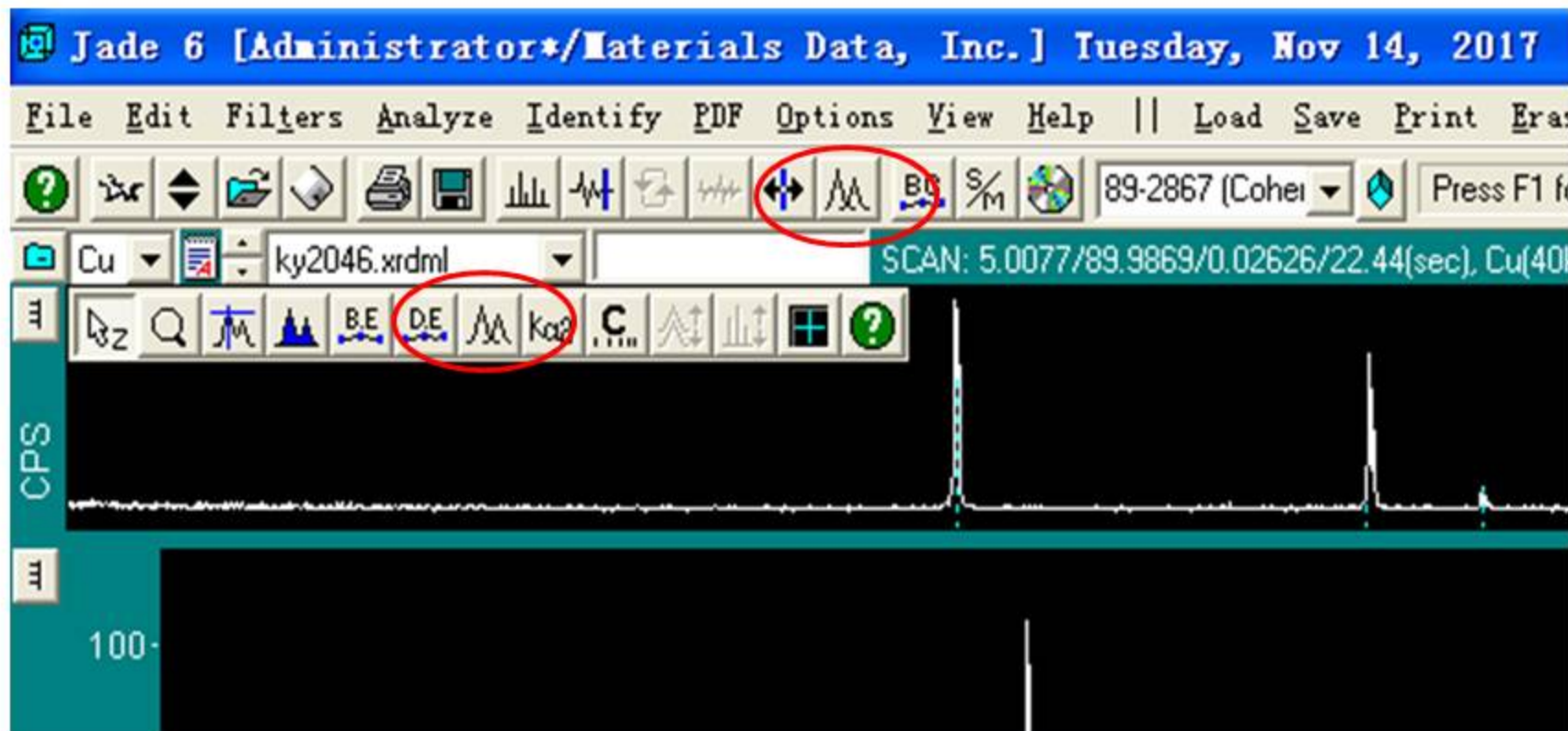






FIT PROFILES

PROFILES EDITING CURSOR



科学 公正 准确 高效

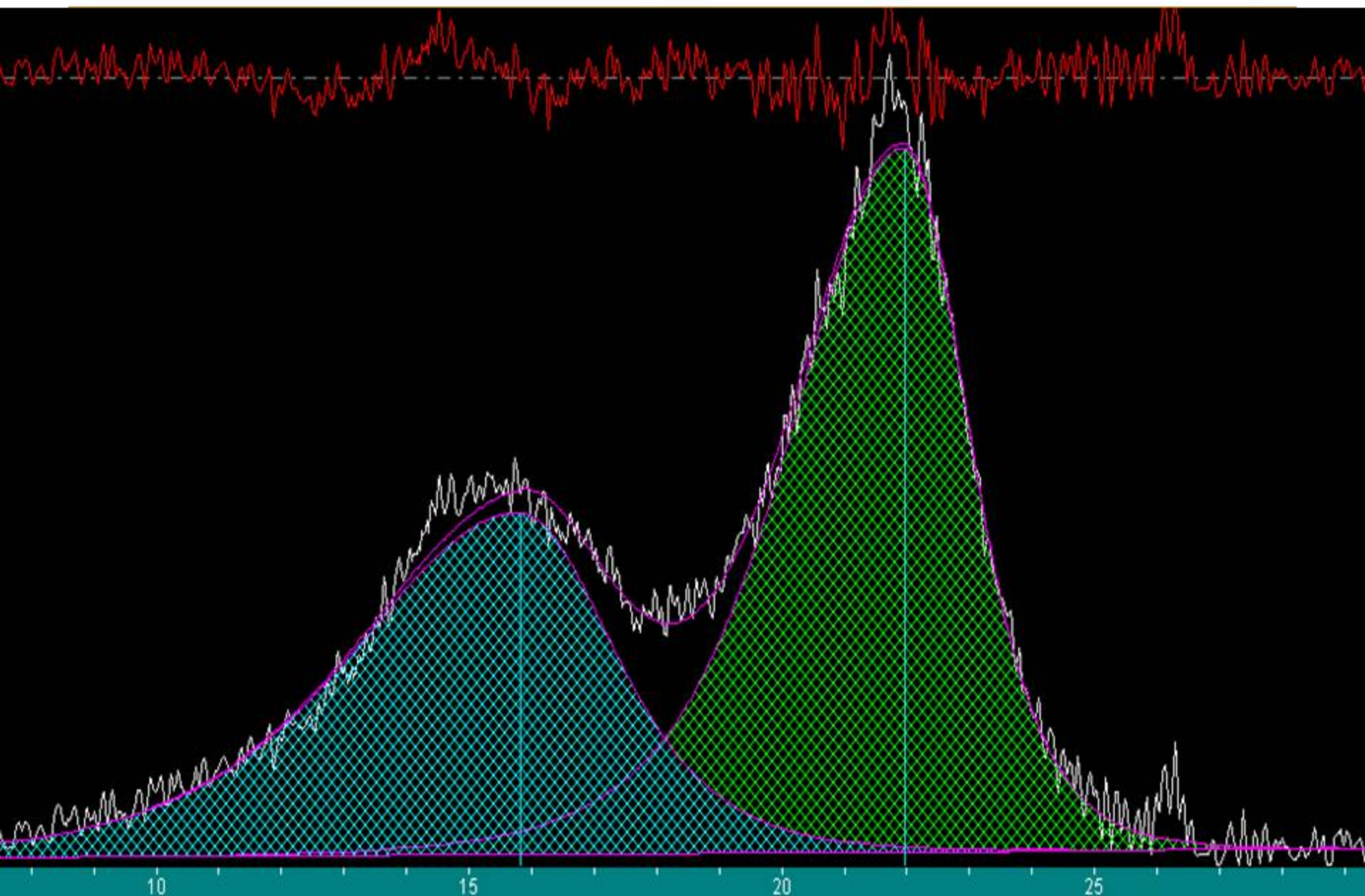




昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology

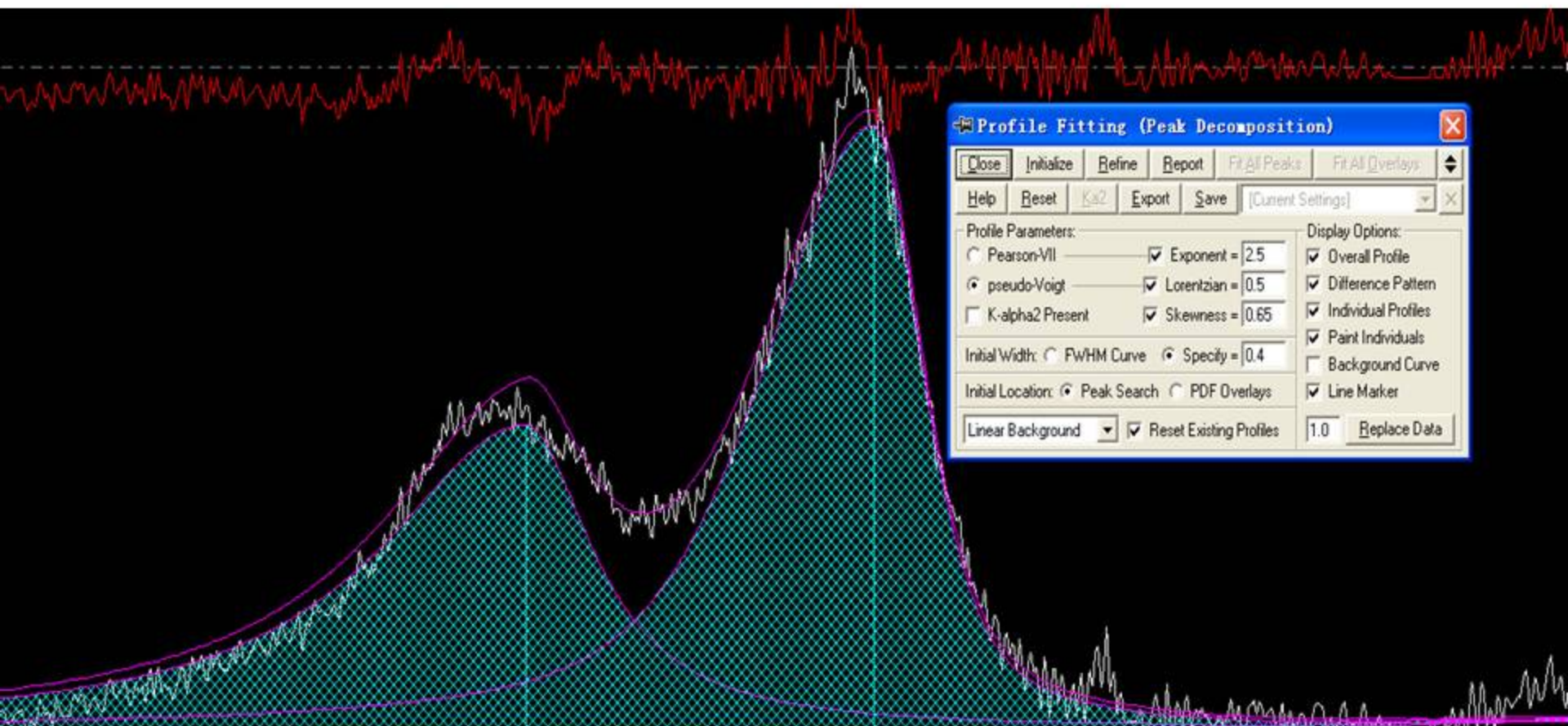


云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan





调整参数，可调节拟合效果





昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

分峰

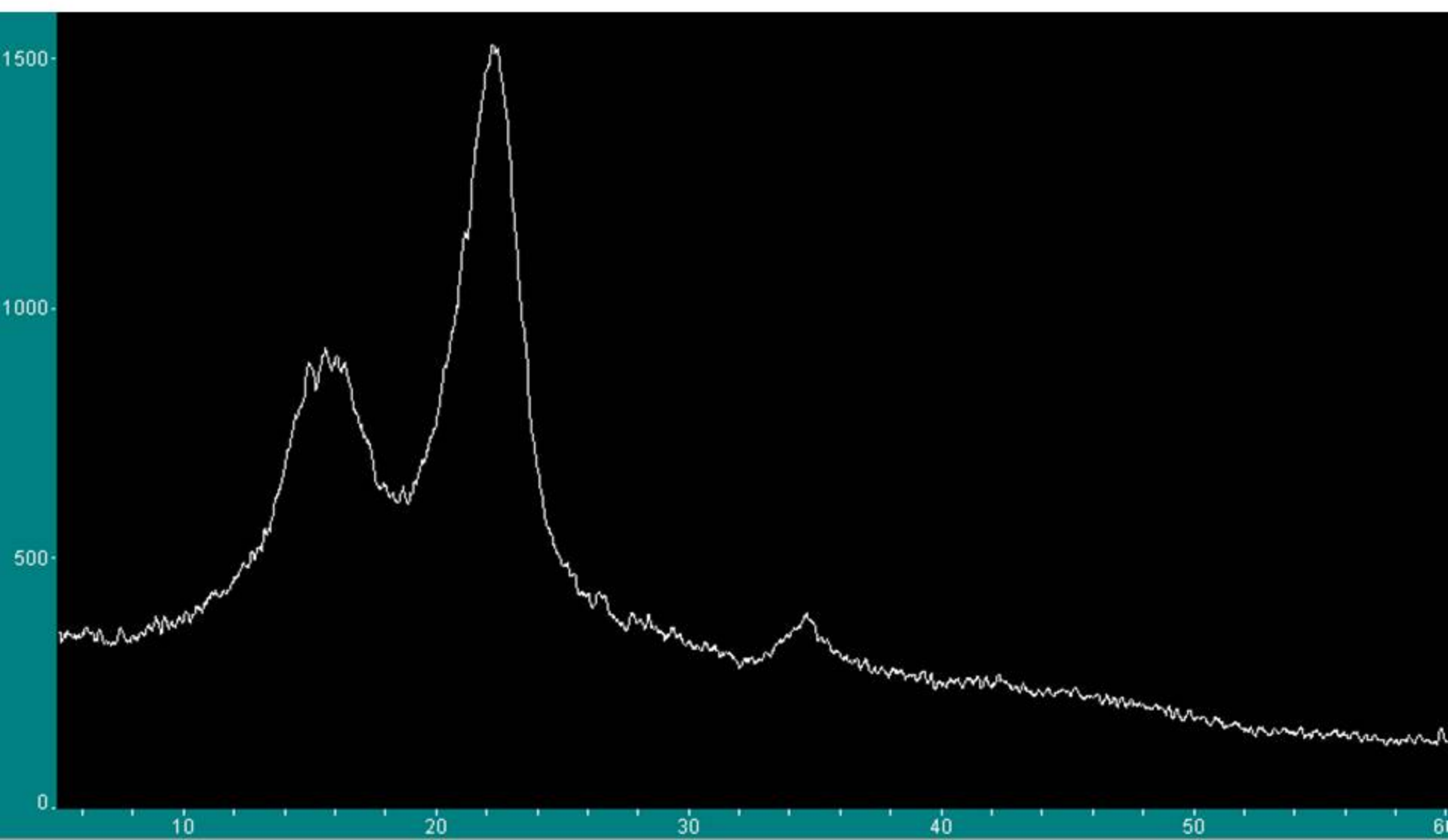


科学 公正 准确 高效



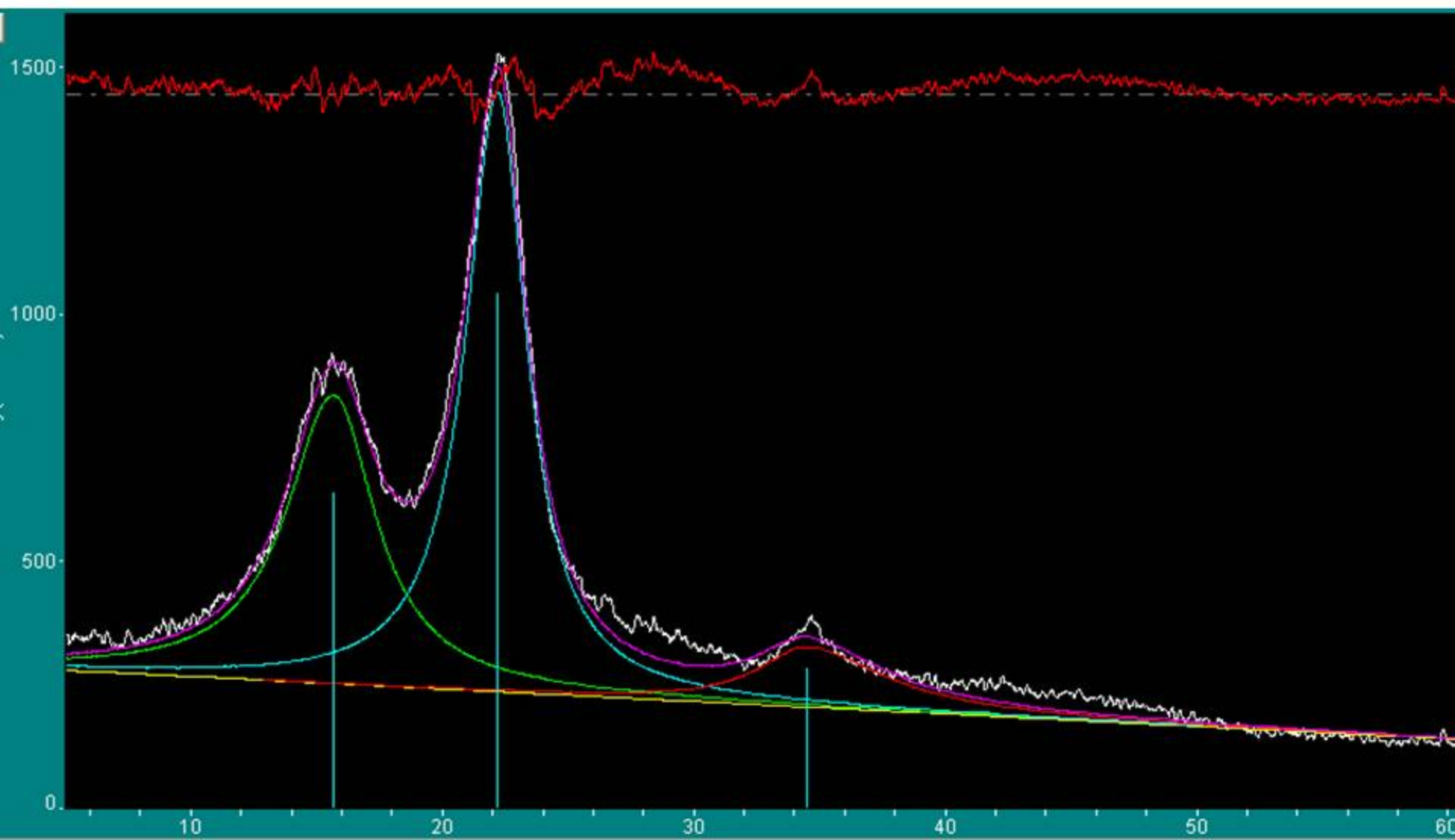


原图



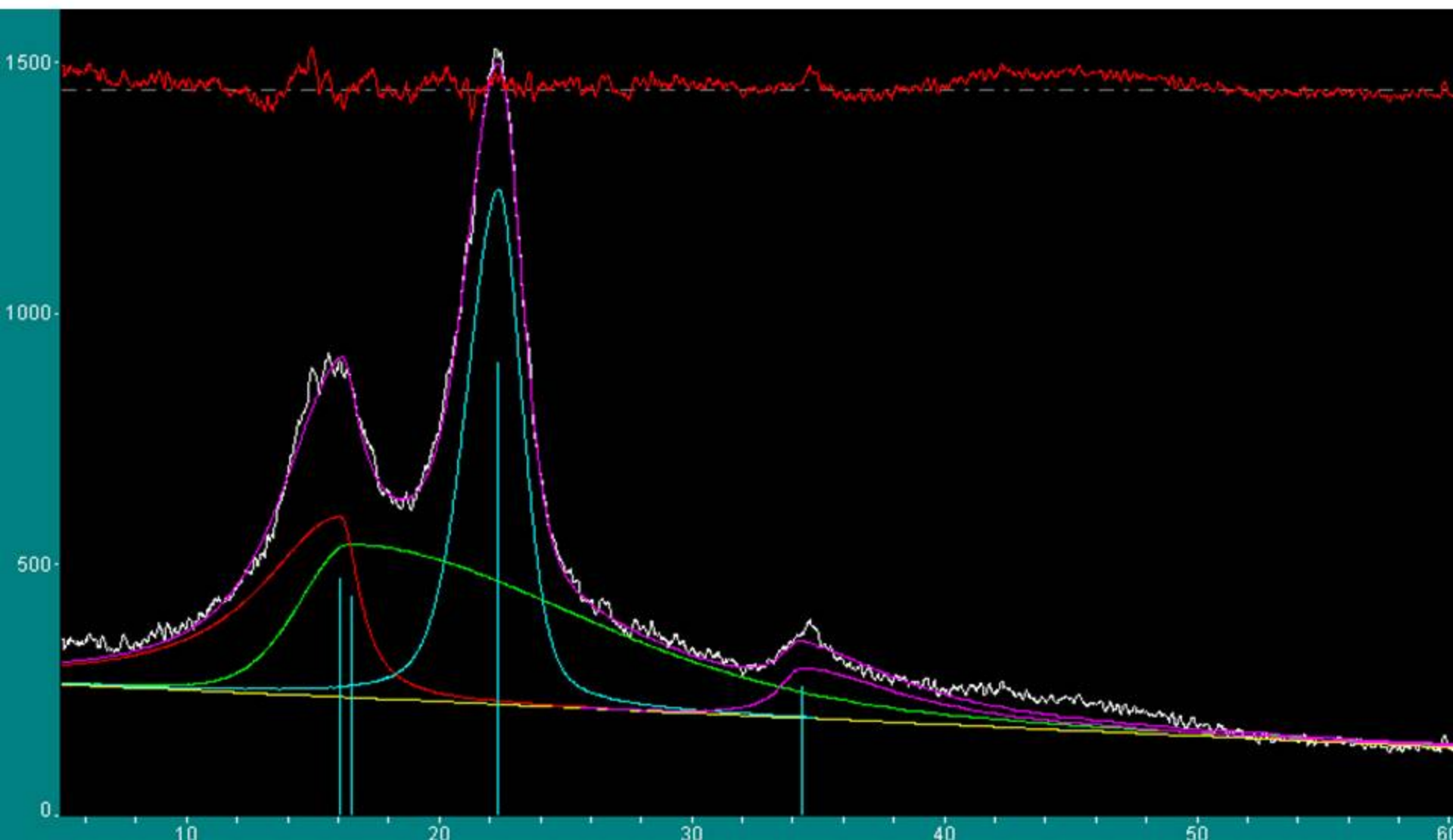


拟合（三个峰）



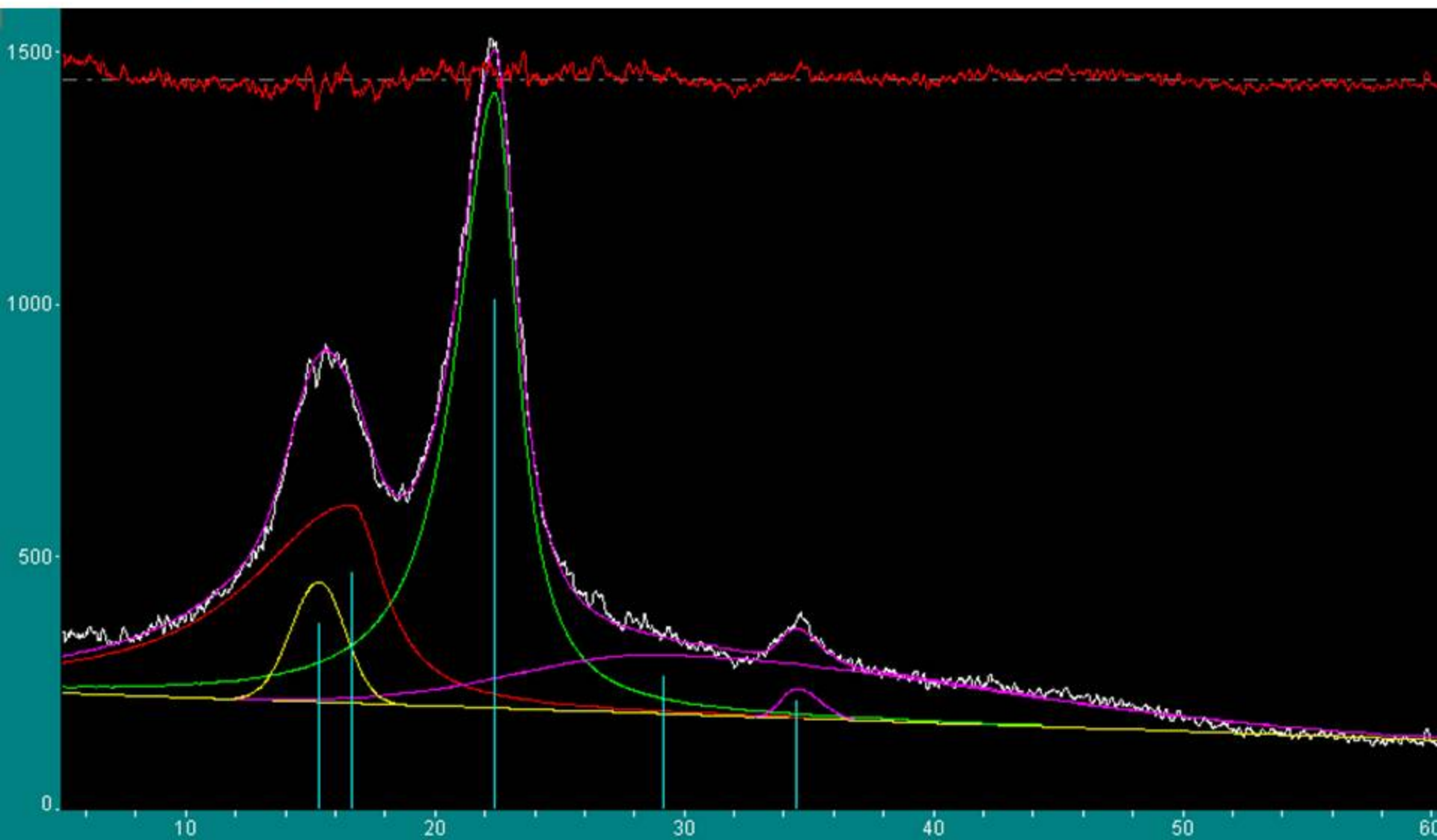


四个峰





五个峰





注意事项

拟合时，误差线越平稳，拟合效果越好。

分峰时，误差线只是衡量最终结果的指标之一，更重要的是，分峰不能盲目。



科学 公正 准确 高效





昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

峰形修整

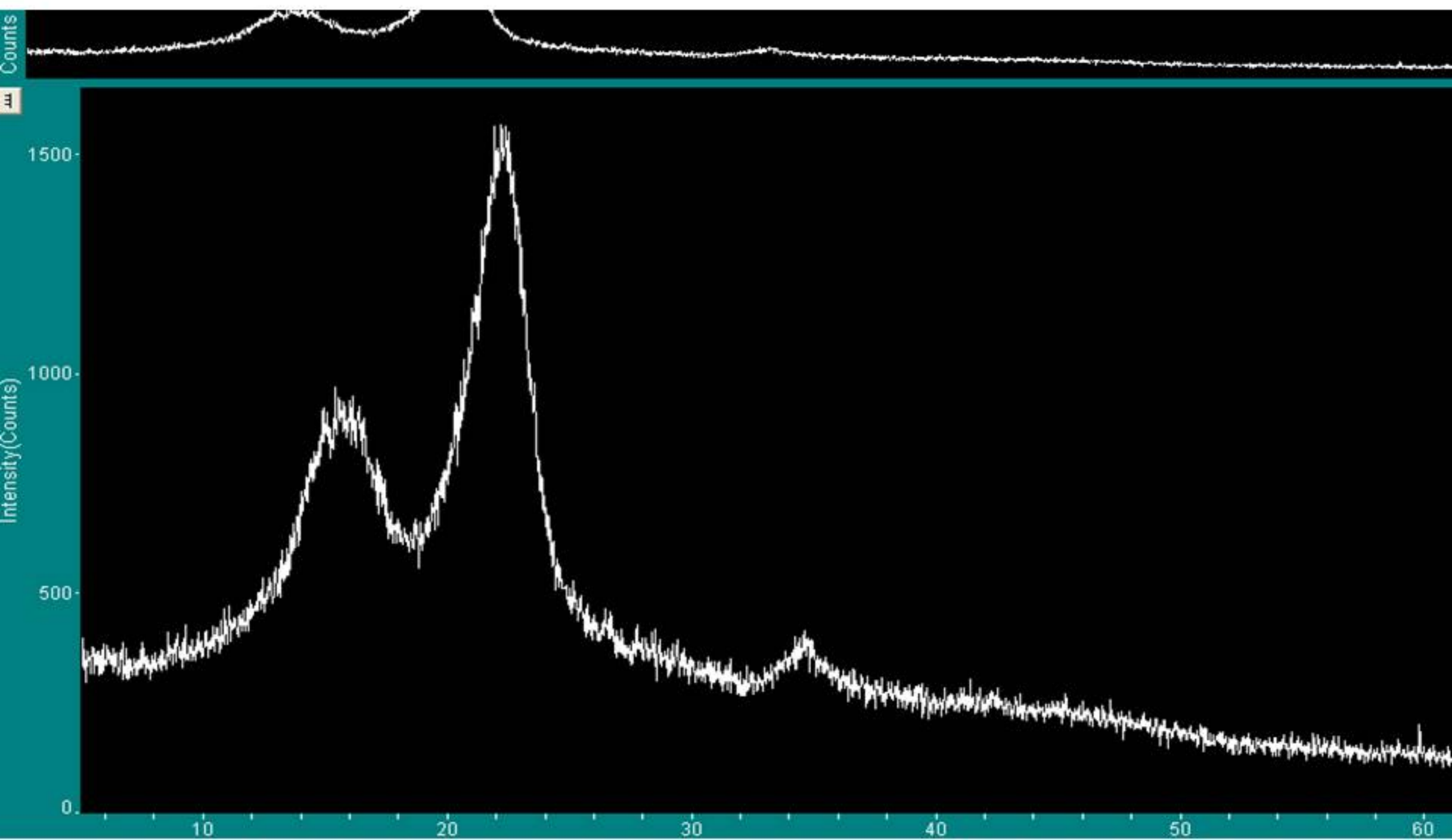


科学 公正 准确 高效



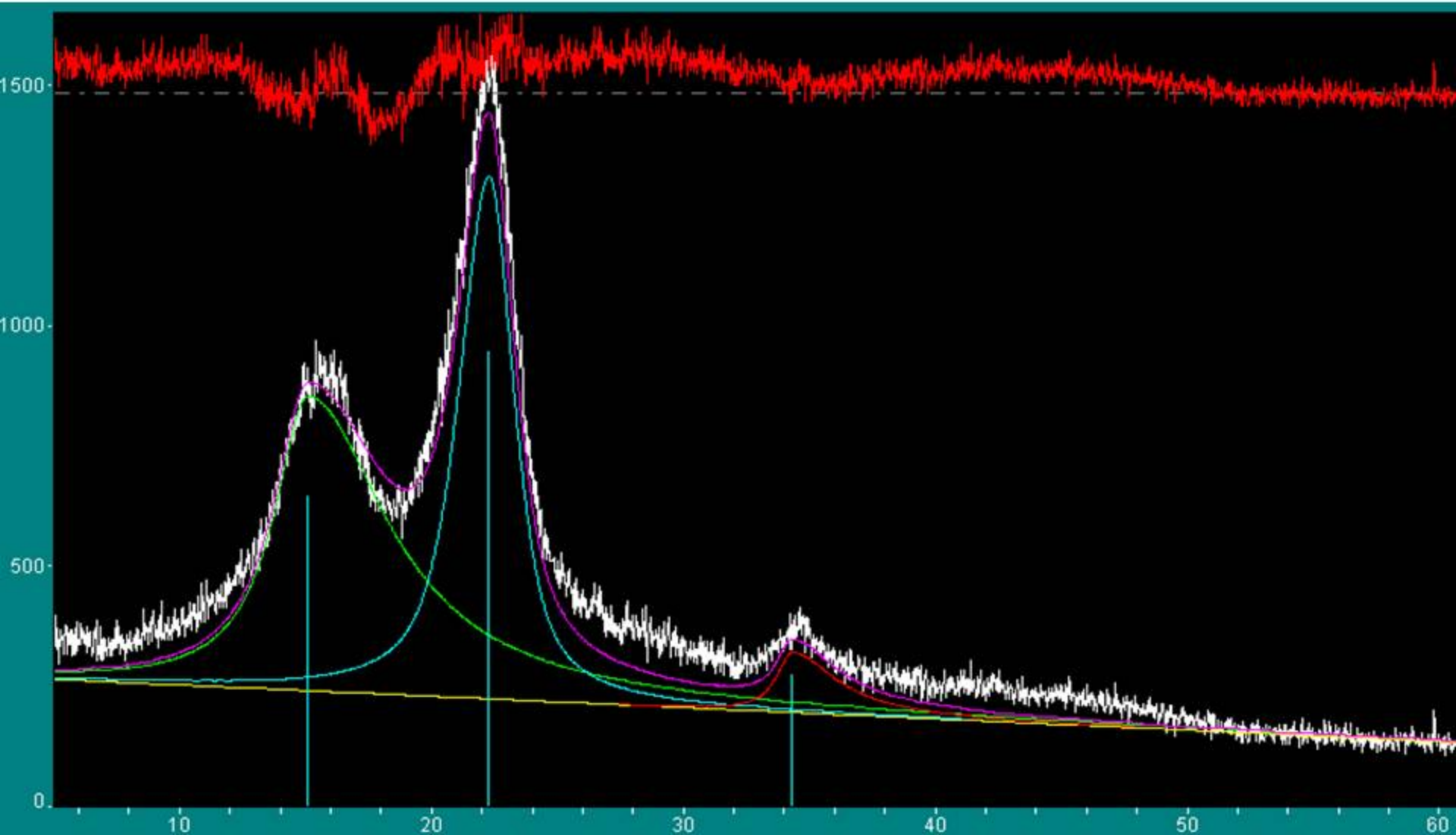


原图



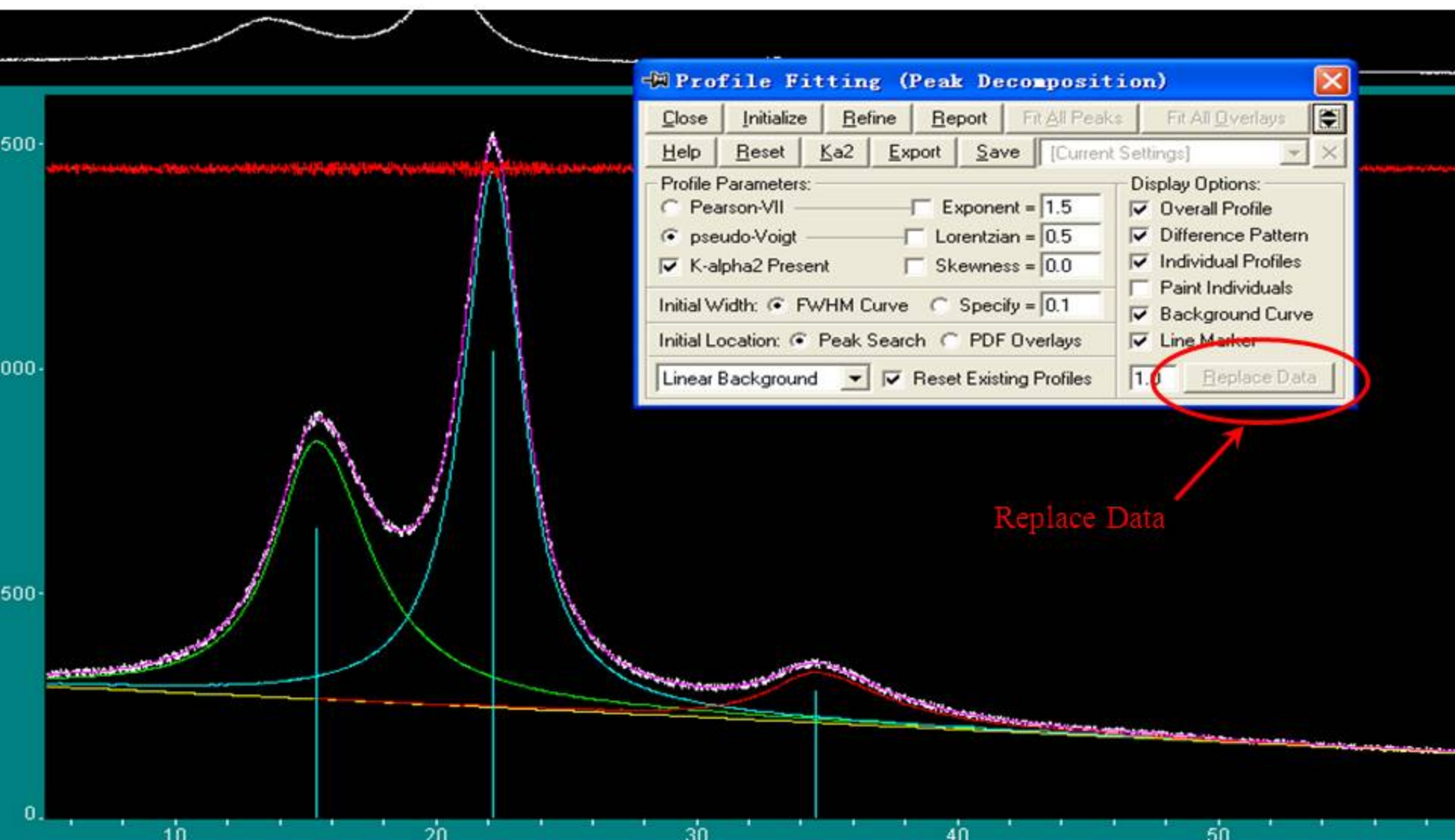


拟合





修整-替代





昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

平滑 SMOOTH

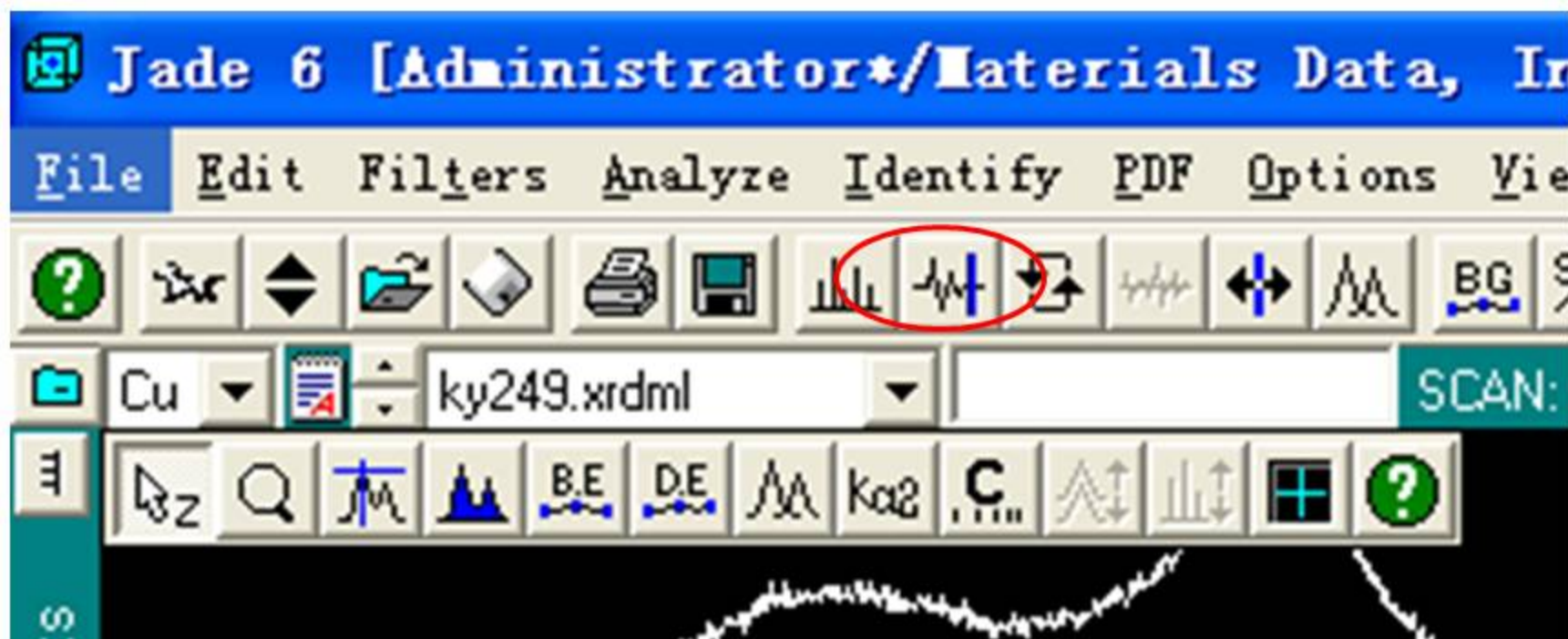


科学 公正 准确 高效





平滑 (SMOOTH ALL)





平滑数据点的间隔

二次多项式

四次多项式

平滑整个图谱

平滑但保留较强峰

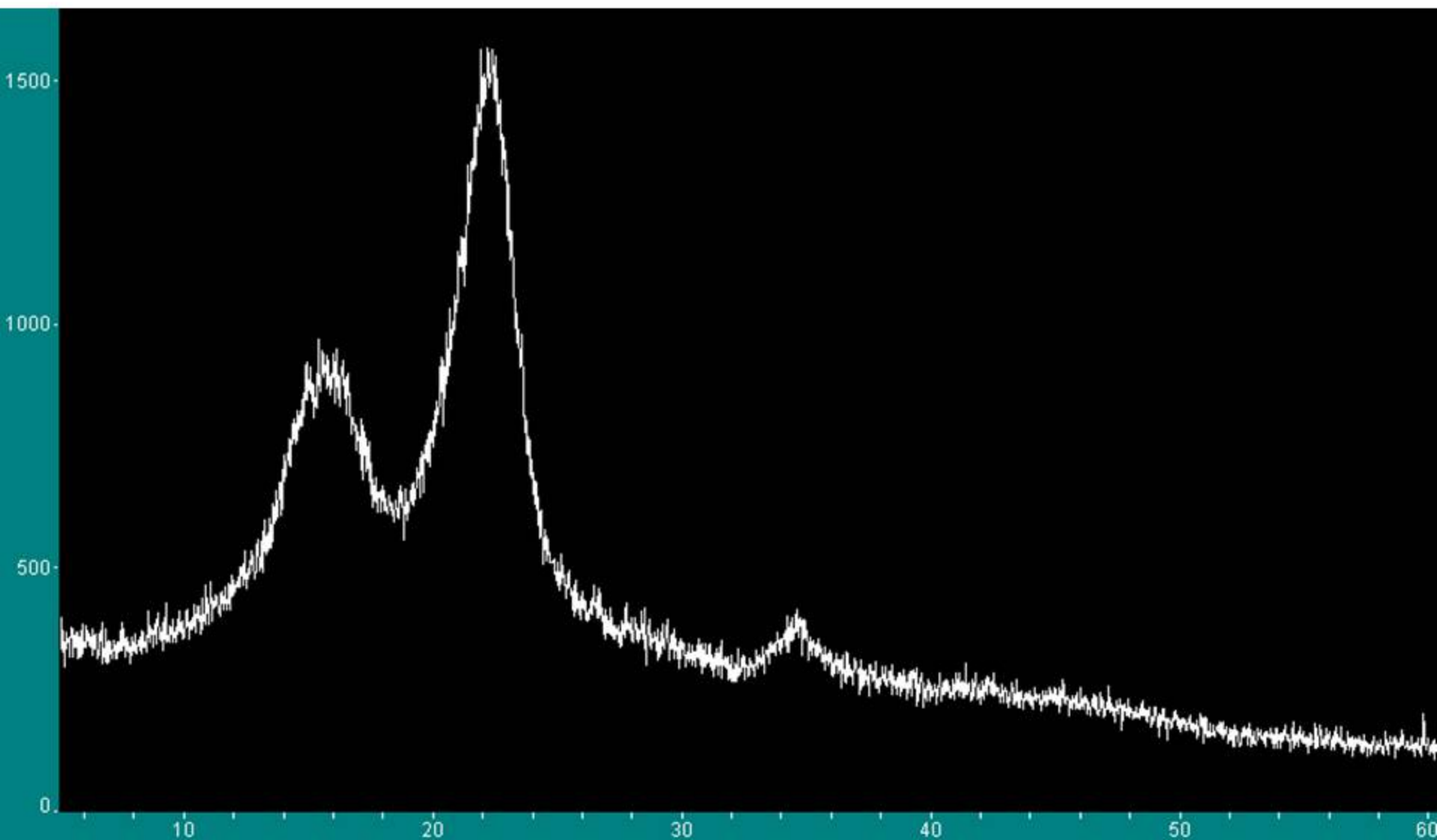
平滑背底

显示1st/2nd次导数



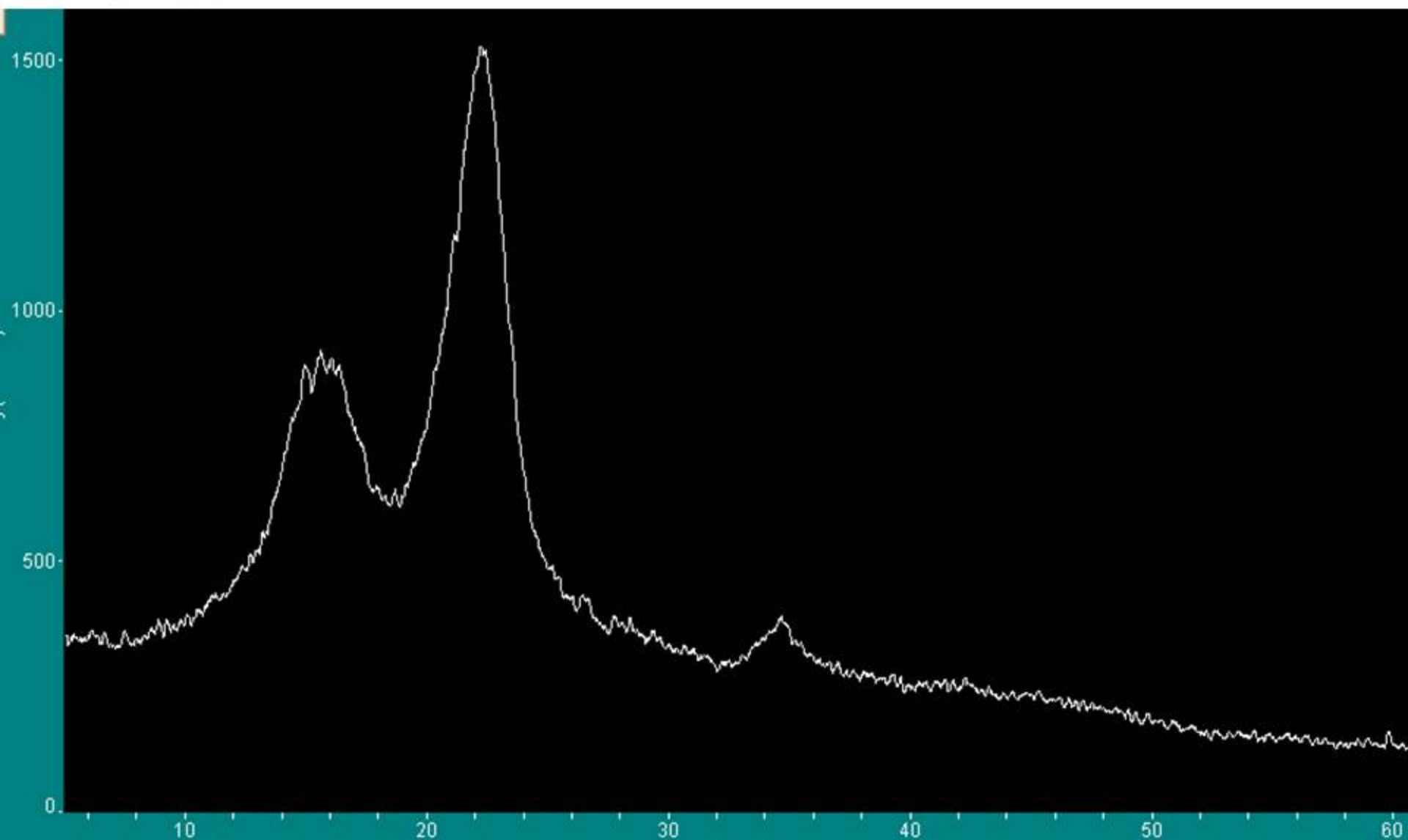


原图





平滑后





昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

本底扣除 REMOVE BACKGROUND

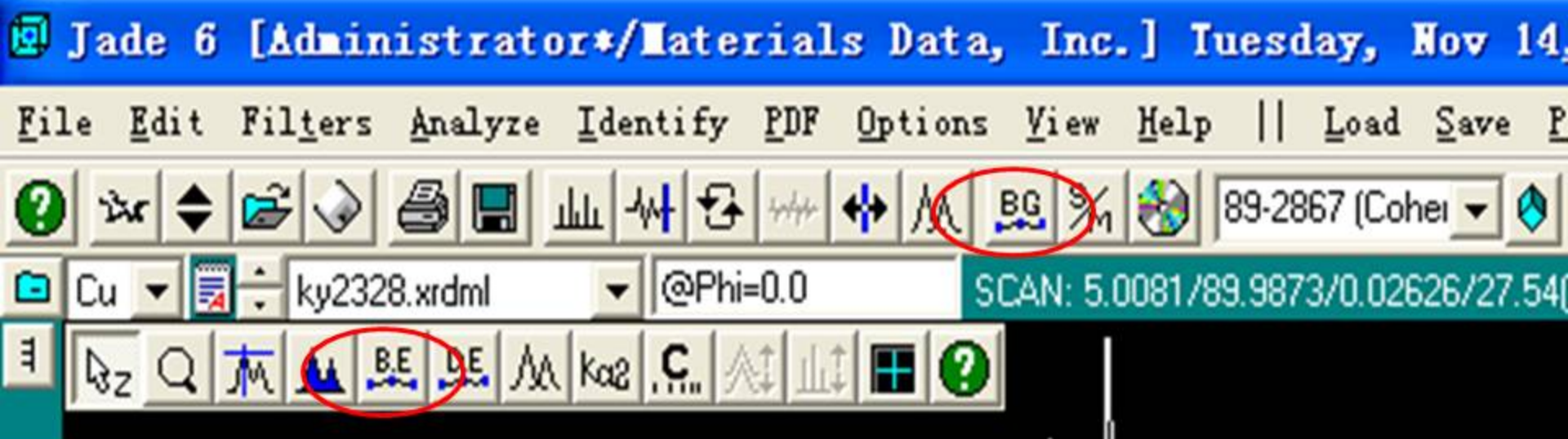


科学 公正 准确 高效



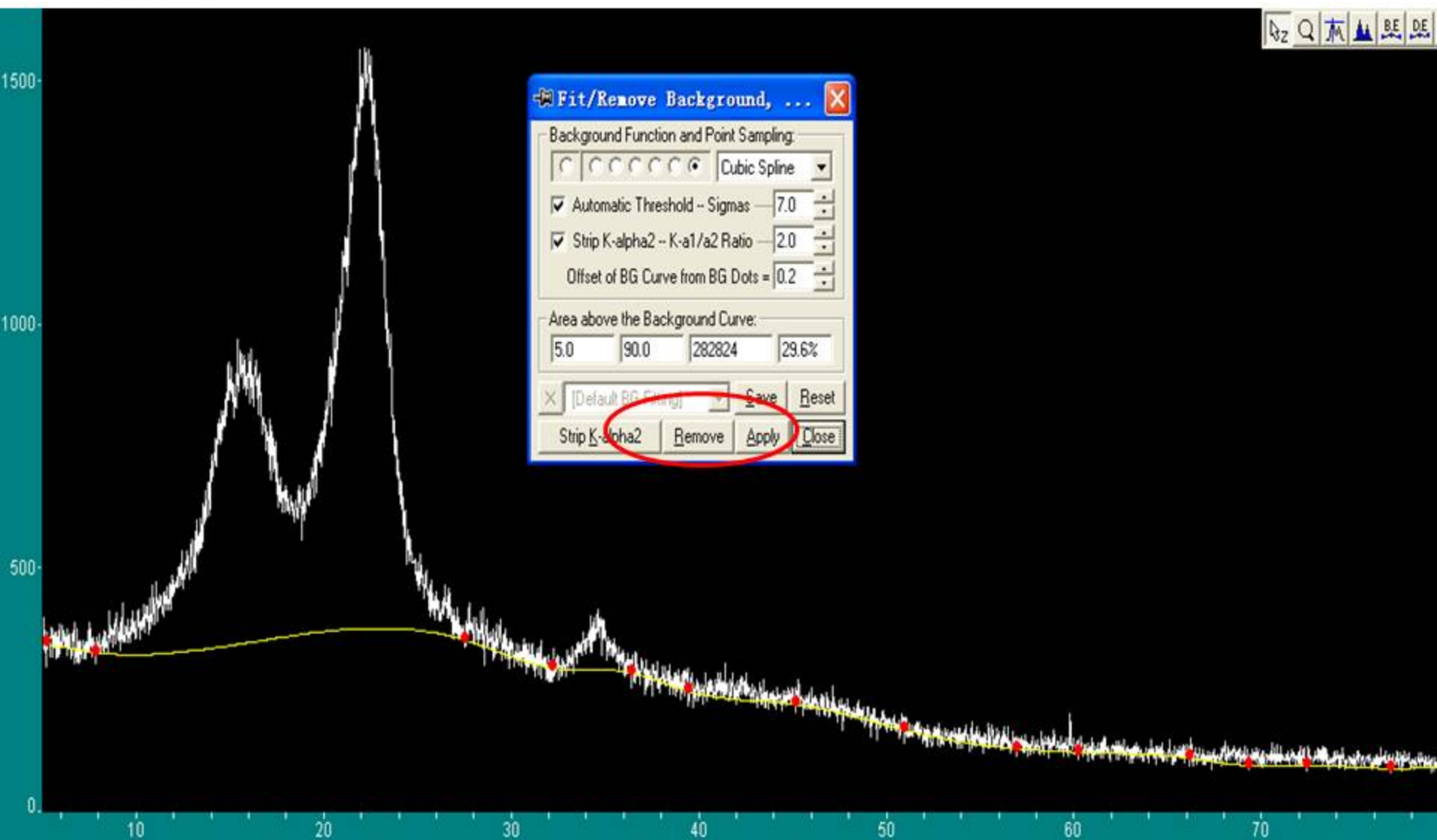


FIT BG BACKGROUND CURVE EDITING



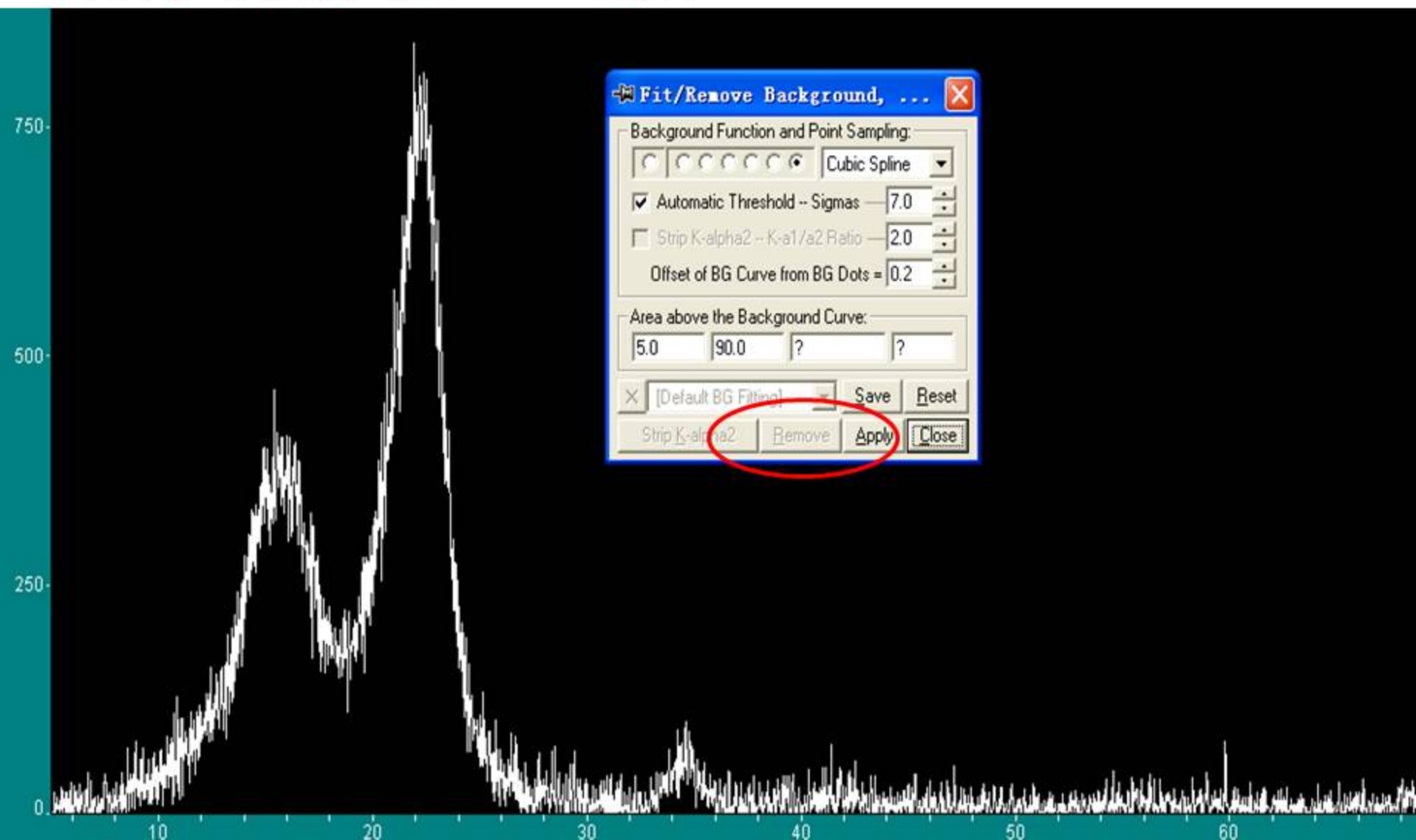


原图



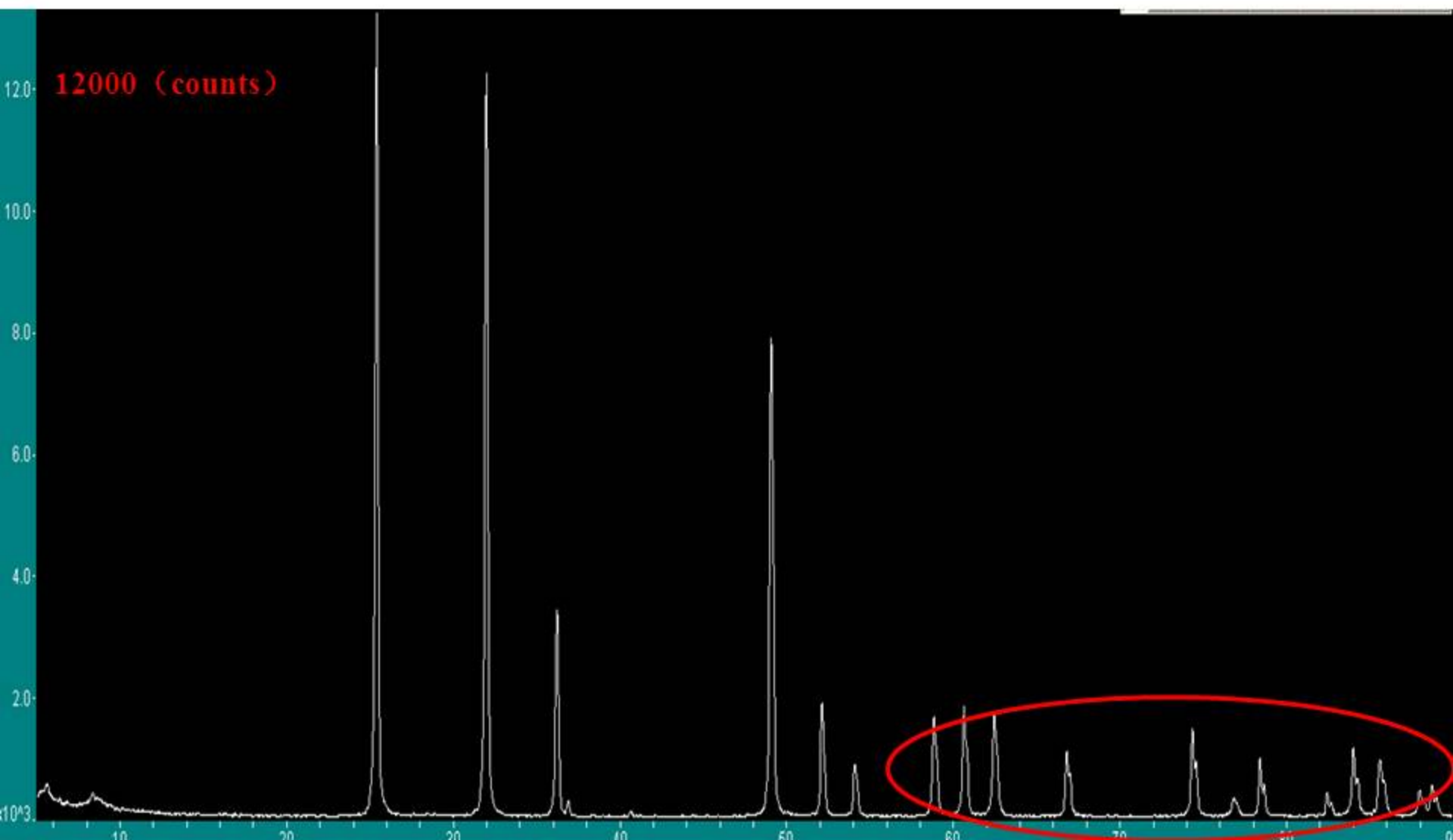


扣除本底以及 $K\alpha_2$ 之后



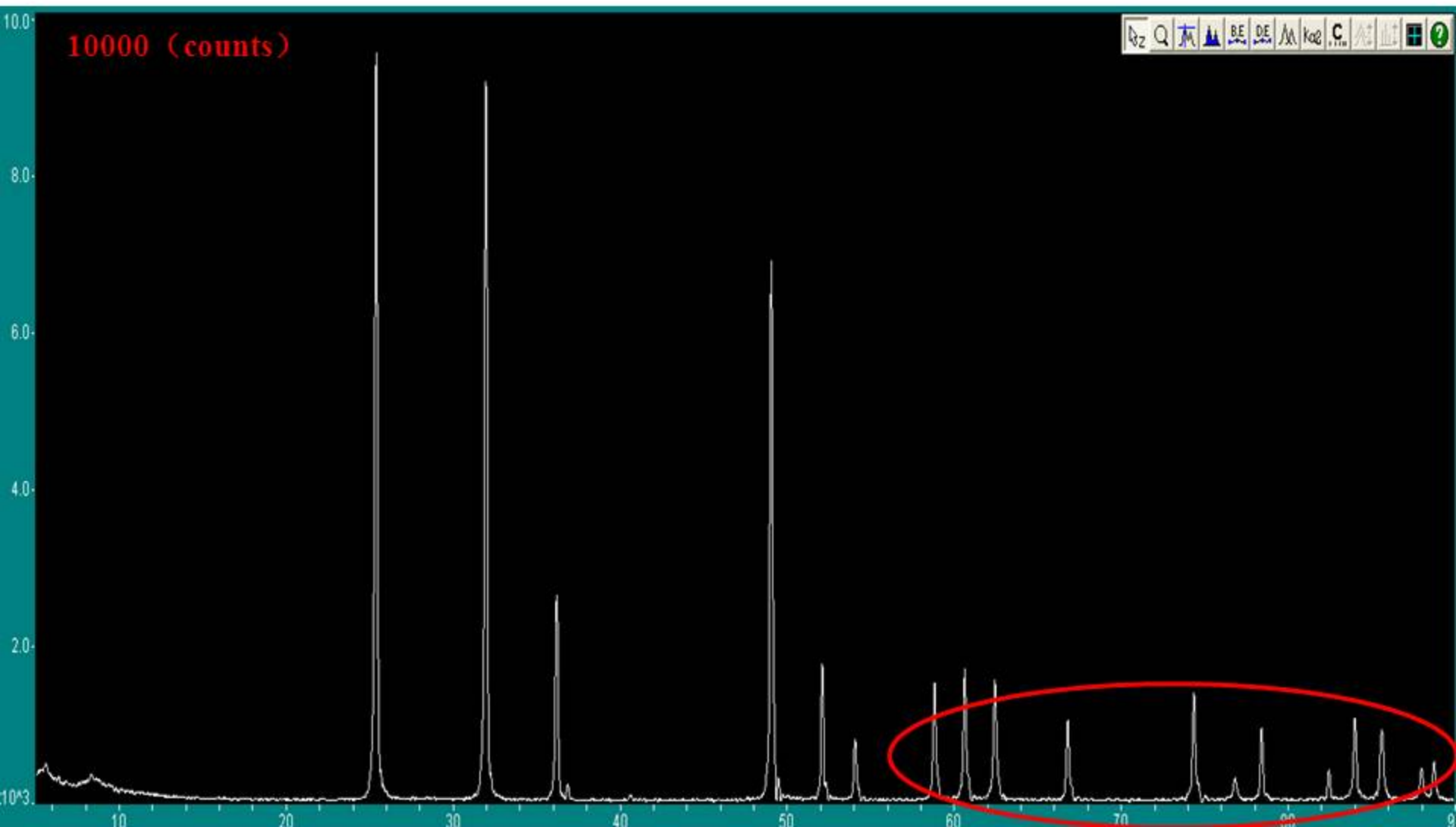


原图





剔除之后





昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



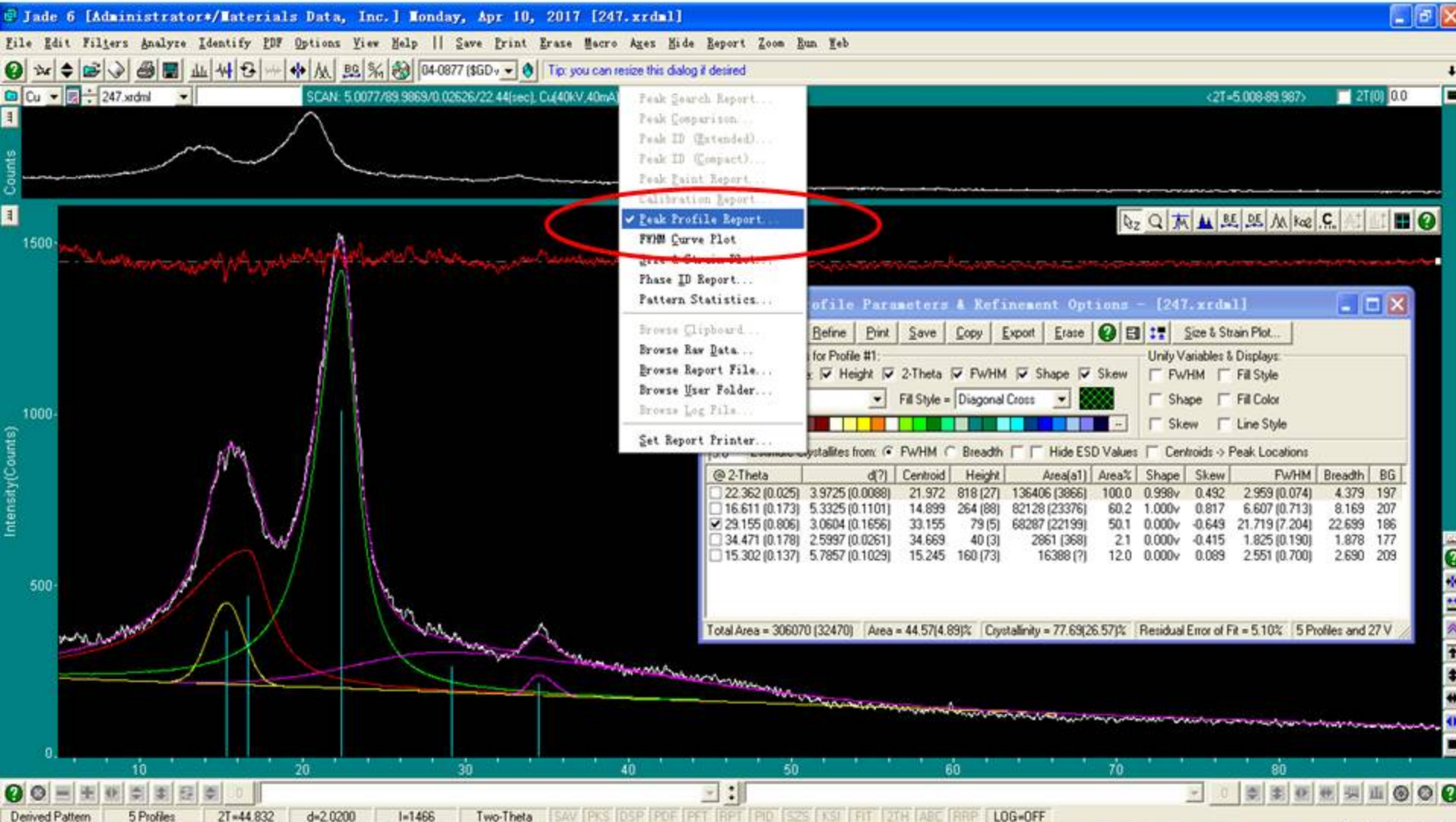
云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

峰信息报告窗口识别



科学 公正 准确 高效







昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

结果输出



科学 公正 准确 高效





打印参数调整（纸张、显示区域、预览等）

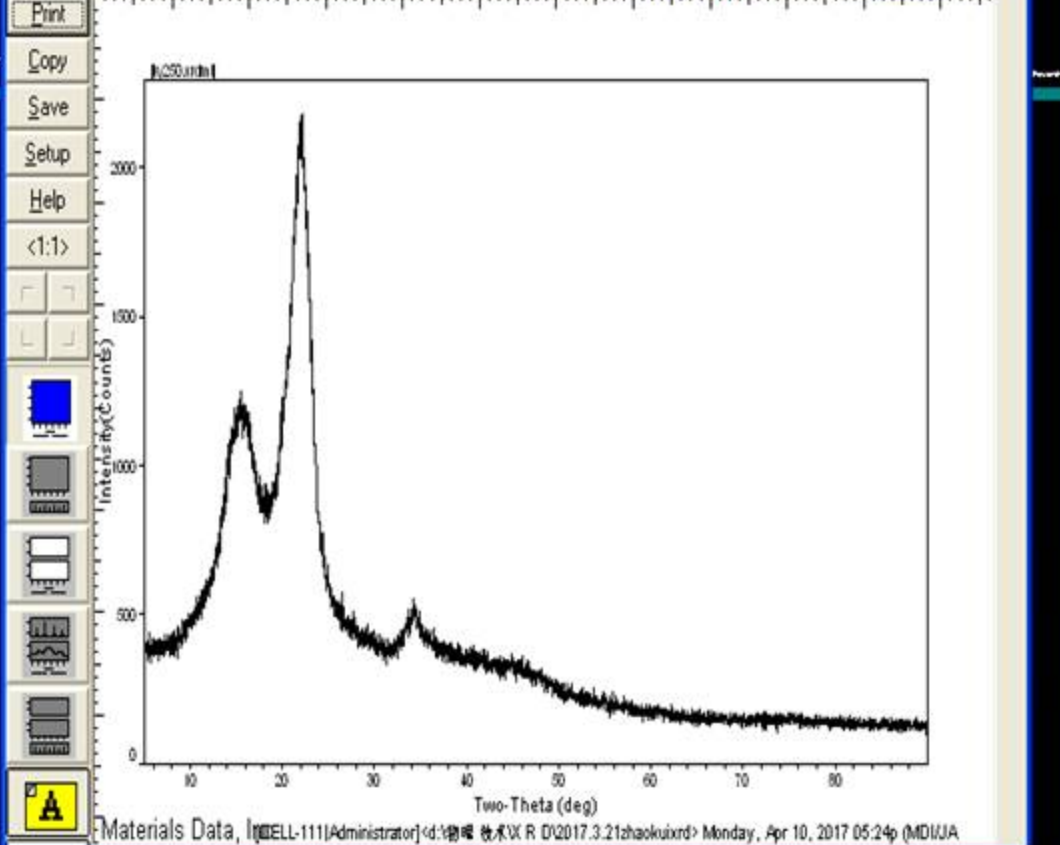
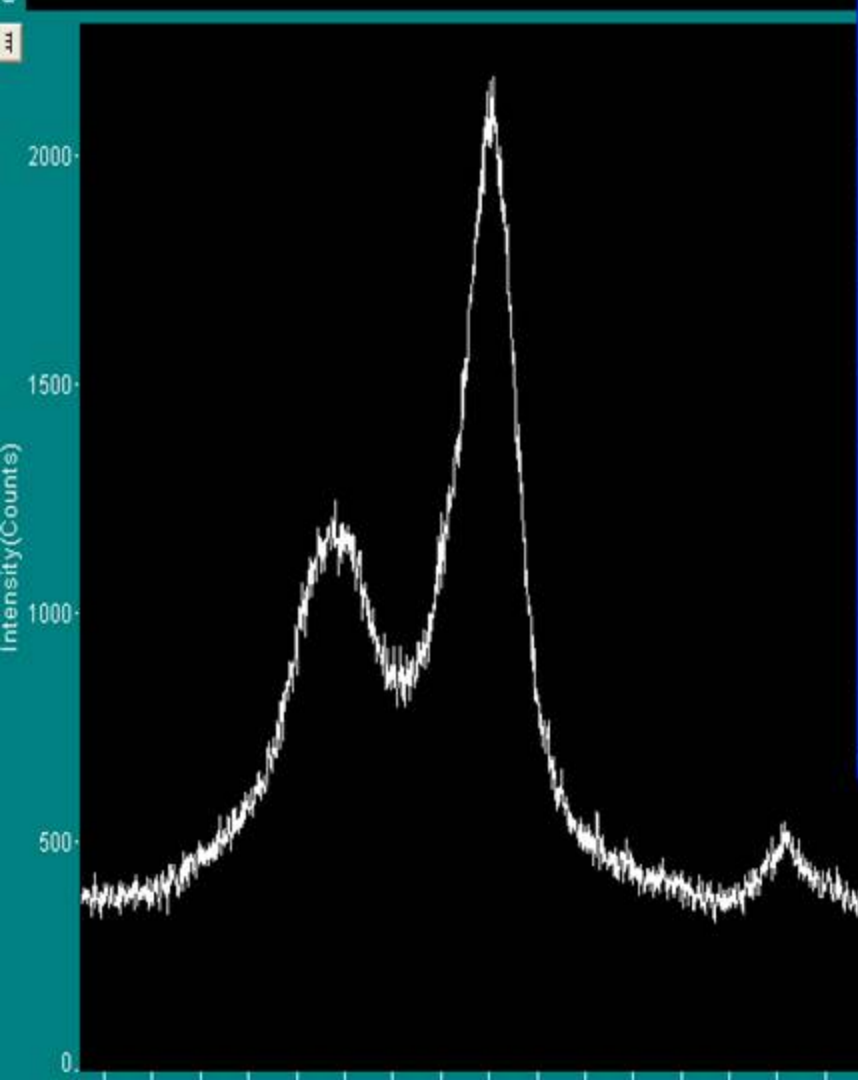
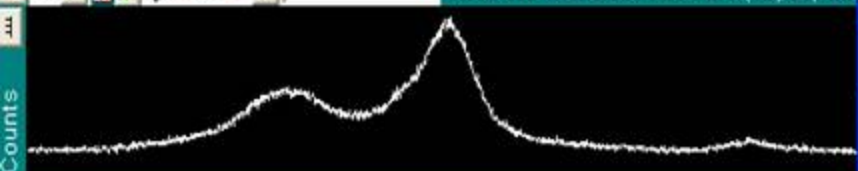
复制/保存

图谱编辑（线条颜色、添加标记、选区放大、物相分栏等）



科学 公正 准确 高效

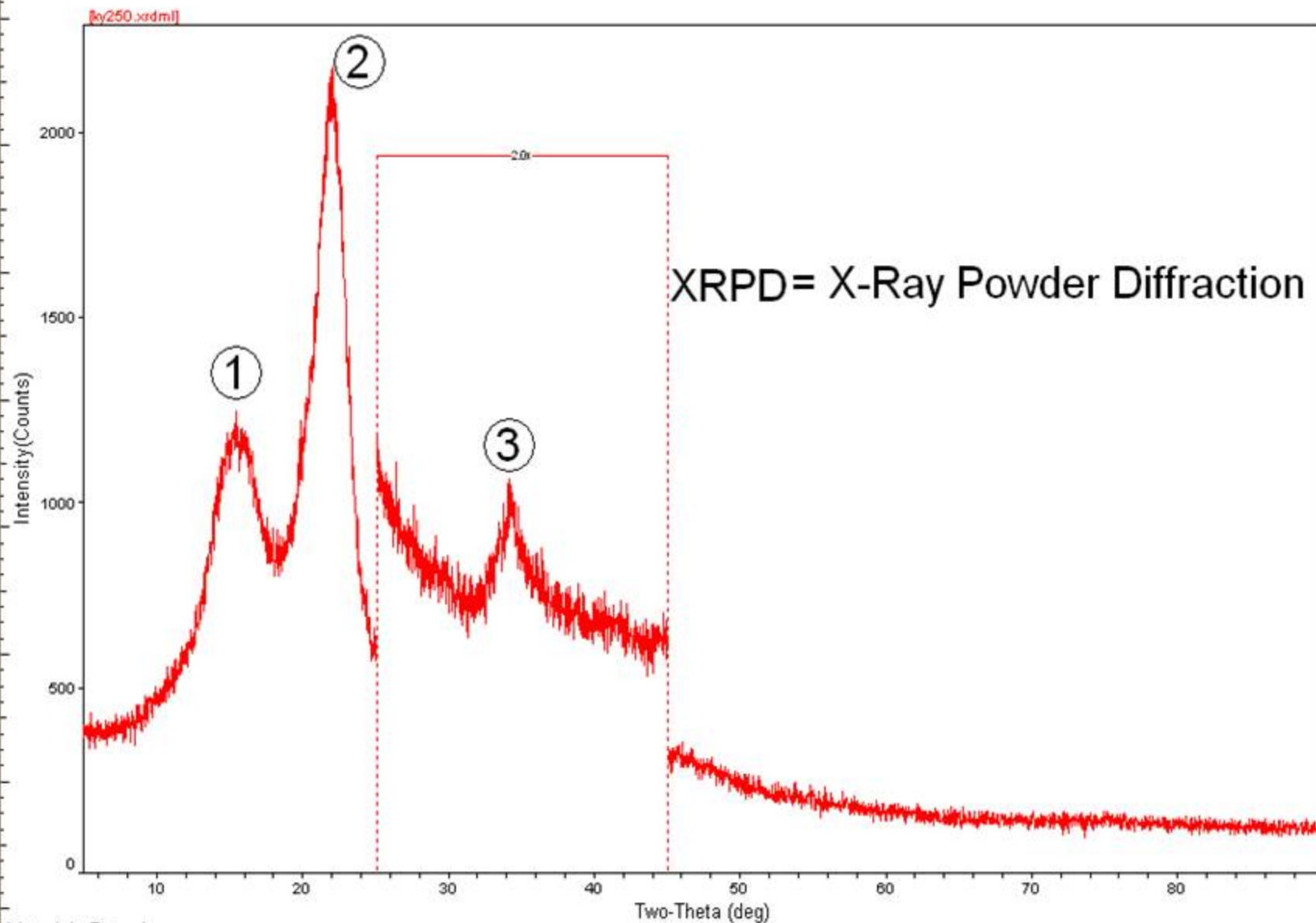




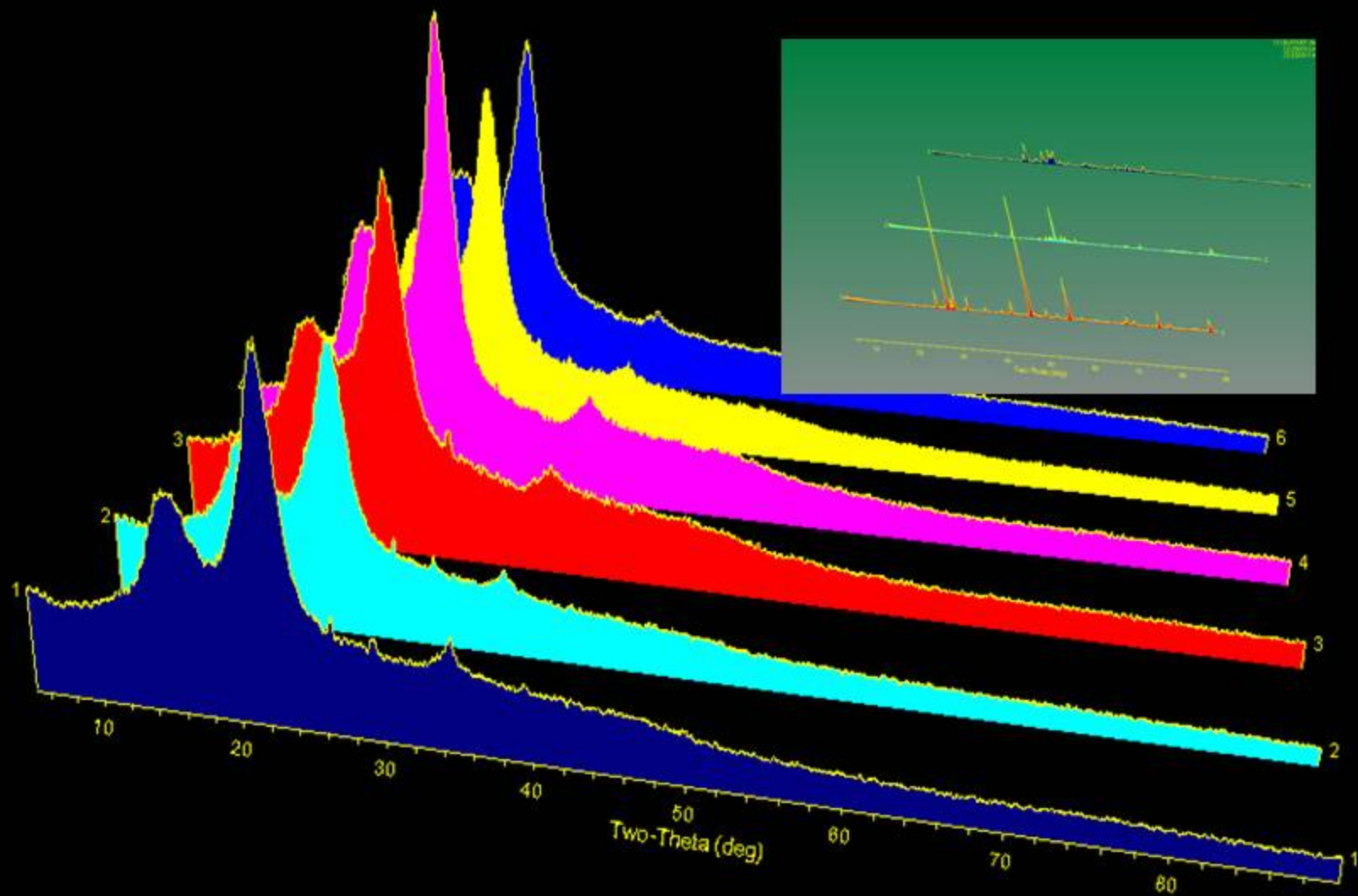
Print
Copy
Save
Setup
Help

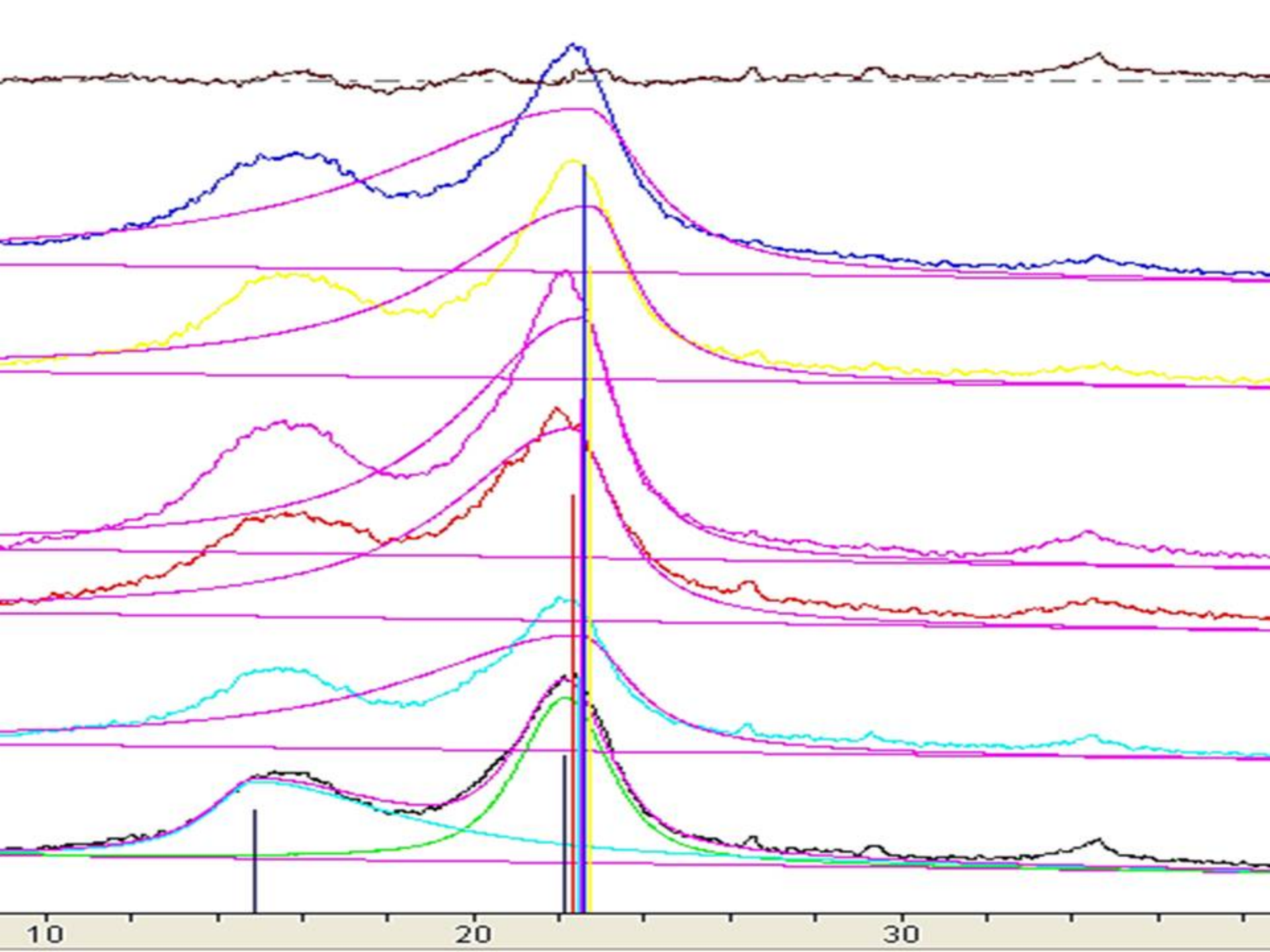
<1:1>

MDI Jade



(6) [ky252.xrdml]
(5) [ky251.xrdml]
(4) [ky250.xrdml]
(3) [ky249.xrdml]
(2) [ky248-2.xrdml]
(1) [ky248-1.xrdml]







Jade中左右键功能各不相同，一般情况下，右键设置左键执行，建议手动，少用自动.....



科学 公正 准确 高效





昆明理工大学分析测试研究中心
Research Center for Analysis and Measurement
Kunming University of Science and Technology



云南省分析测试中心
Analytic & Testing Research Center of Yunnan

欢迎批评指正，谢谢！

王春建

QQ: 290296149

E-mail: wangchunjian2013@126.com

- 昆明理工大学分析测试研究中心
- 云南省分析测试中心

科学 公正 准确 高效

