

MATCH! Inicio Rápido

Instalación

Antes de proceder a la instalación de Match! En su ordenador, por favor compruebe los requisitos mínimos del sistema.

- Microsoft Internet Explorer 5.01 o superior.
- 128 Megabites de RAM instalada (se recomienda 256)
- 800 Megabites de espacio libre en el disco duro
- Tarjeta gráfica configurable a 1024 x 768 pixels con una profundidad de color de 32 bits, la más alta.

Inserte el disco del programa en su disquetera y espere a que inicie y aparezca el menú de instalación; pulse sobre el botón con el logo de "Match!". La instalación comenzará y le guiará paso a paso.



Lo básico: Importar un difractograma - Iniciar el proceso de búsqueda y cotejo - Seleccionar las posibles fases - Finalizar el trabajo.

Veamos un ejemplo muy simple para llamar su atención y comprobar el uso y la gran capacidad del programa. Imagine que tiene en sus manos un difractograma de una muestra mineral de alta calidad.

Si el programa no está en funcionamiento, arránquelo mediante doble clic en su icono del escritorio. Se abrirá la ventana principal. En ella distinguiremos:



Match!

File View Pattern Peaks Search Entry Tools Help

Color	Qual.	Entry	Formula	Name	P(peakpos.)	P(I/10)	I scale fct.	Quant.(%)	FoM
		--		No diffractio peaks present	1.0000	1.0000	1.0000	--	1.0000

(Result list) Lista de resultados

En este área aparecerá el listado de patrones cotejados desde nuestra base de datos (entradas), que tengamos activa.

(Main Toolbar): Barra principal de herramientas

Se accede mediante botones a las operaciones más importantes del programa

Intensity

(Pattern Graphics) Área gráfica

En este área Se verá el difractograma en estudio y se podrá comparar con los picos de los distintos patrones cotejados.

Peak list is empty.

(Peak list) Lista de picos:

En este área aparecerán los datos de los picos del difractograma activo y los datos de referencia de los picos de los patrones para su comparación.

68536 IUCr / COD / AMCSO 21.04.08 Figure-of-Merit: Ov Conselleria de Cultura, Educación y Deporte, Escuela Superior de Cerámica de Manises, Single Licence

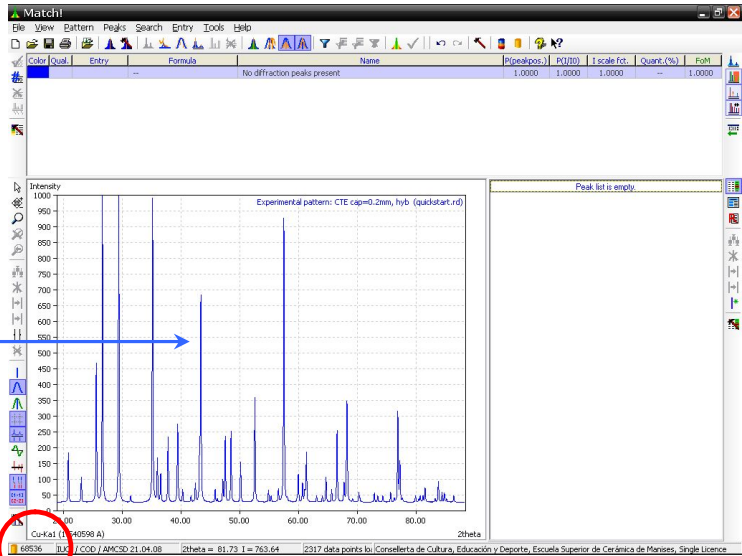
Importar un difractograma La primera tarea que se debe realizar es la importación del difractograma en estudio. En nuestro ejemplo lo haremos seleccionando desde el menú File / Import ► / Diffraction data o pulsando este botón



En el cuadro de diálogo que se abre seleccionamos y abrimos el archivo "quickstart.rd", que se encuentra en la ruta C:\Archivos de programa \ Match! \ Tutorial \ quickstart.rd

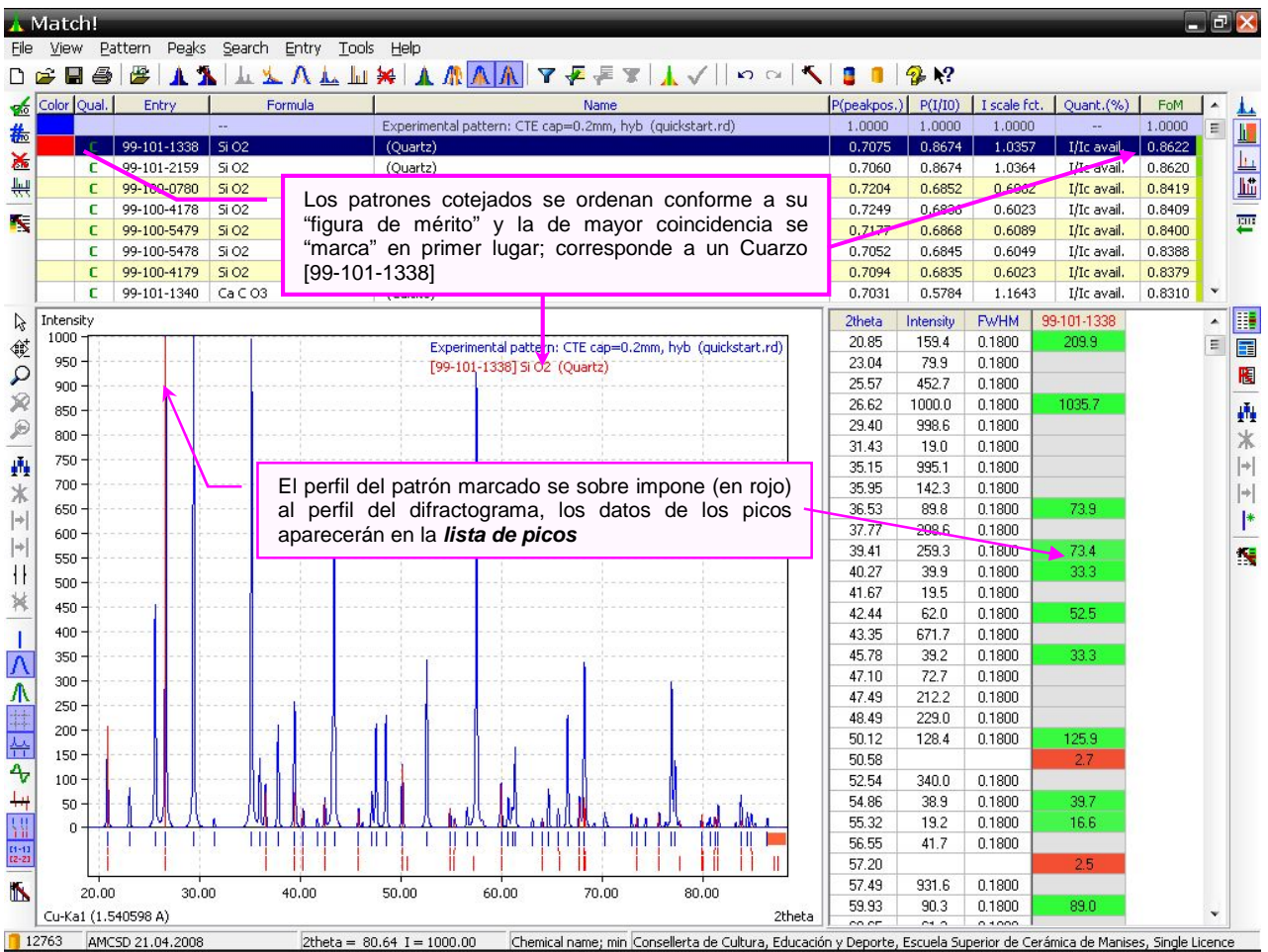
El difractograma aparecerá en el área gráfica.

Perfil fuente del difractograma experimental (raw) importado en el área gráfica. Aparece en azul.



ATENCIÓN La "Base de datos activa" puede conocerse observando la esquina inferior izquierda de la pantalla (circulo rojo) podemos ver que es la AMSCD y contiene 12763 "entradas" o patrones cotejables.

Iniciar el proceso de búsqueda y cotejo Pulsamos la combinación de teclado <ctrl+M> o el botón con el icono del Match! de la barra de botones principal. El programa buscará y cotejará automáticamente los perfiles de la Base de datos activa. En mi caso los 12763 perfiles de AMSCD cargada el 21 de abril 2008. El proceso es automático.



Seleccionar las posibles fases Además del patrón marcado automáticamente como mejor candidato en la lista de resultados, podemos inspeccionar otras posibilidades (otras especies con otros perfiles y picos) sencillamente desplazándonos en la lista con el cursor o moviendo la rueda del ratón (si tiene rueda); conforme cambiamos la selección los nuevos perfiles se sobre imponen a la imagen y los datos de sus picos aparecerán en la lista de picos.

Si el primer patrón nos parece aceptable tenemos que seleccionarlo y aceptarlo marcándolo como “*¡coincidente!*” (“*match!*”), basta con pulsar la barra espaciadora cuando esté seleccionado o hacer “doble clic” en cualquier punto de la línea que lo define.

Color	Qual.	Entry	Formula	Name	P(peakpos.)	P(I/I0)	I scale fct.	Quant.(%)	FoM
		--		Experimental pattern: CTE cap=0.2mm, hyb (quickstart.rd)	1.0000	1.0000	1.0000	--	1.0000
	C	99-101-1338	Si O2	(Quartz)	0.7075	0.8674	1.0357	100.0	0.8622
	C	99-100-9271	Al2 O3	(Corundum)	0.7106	0.7891	0.8009	I/Ic avail.	0.8271
	C	99-100-8318	Al2 O3	(Corundum)	0.7084	0.7895	0.8004	I/Ic avail.	0.8254
	C	99-101-1340	Ca C O3	(Calcite)	0.7024	0.9193	1.0205	I/Ic avail.	0.8192
	C	99-101-1403	Al2 O3	(Corundum)	0.7084	0.7895	0.8004	I/Ic avail.	0.8085
	C	99-101-1396	Al2 O3	(Corundum)	0.7084	0.7895	0.8004	I/Ic avail.	0.8036
	C	99-100-9285	(Al1.82 Cr.18) O3	(Corundum)	0.7084	0.7895	0.8004	I/Ic avail.	0.8034
	C	99-100-8320	Al2 O3	(Corundum)	0.7084	0.7895	0.8004	I/Ic avail.	0.7993

La especie aceptada se muestra en negrita y la línea se colorea intensamente. Los patrones de igual especie (Cuarzo) desaparecen de la lista, porque las correspondientes intensidades de los picos están ocupadas por las del patrón aceptado; el Cuarzo [99-101-1338]

Recorriendo la lista de patrones veremos los candidatos de la segunda fase; movemos la rueda o usamos el cursor arriba y abajo. Parece que el corindón [99-100-9271] se ajusta bien a nuestros datos, procedemos a aceptarlo (barra espaciadora) y veremos que

Color	Qual.	Entry	Formula	Name	P(peakpos.)	P(I/I0)	I scale fct.	Quant.(%)	FoM
	C	99-101-1338	Si O2	(Quartz)	0.7075	0.8674	0.9889	20.8	0.8622
	C	99-100-9271	Al2 O3	(Corundum)	0.7106	0.7891	0.8023	79.2	0.8271
	C	99-101-1340	Ca C O3	(Calcite)	0.7024	0.9193	1.0205	I/Ic avail.	0.8343
	C	99-100-8717	Ca C O3	(Calcite)	0.6404	0.9157	1.0119	I/Ic avail.	0.8108
	C	99-101-1339	Ca C O3	(Calcite)	0.6369	0.9210	1.0246	I/Ic avail.	0.8106
	C	99-100-0095	Ca C O3	(Calcite)	0.6404	0.9157	1.0119	I/Ic avail.	0.8105
	C	99-100-0971	Ca C O3	(Calcite)	0.6404	0.9157	1.0119	I/Ic avail.	0.8085
	C	99-100-8724	Ca C O3	(Calcite)	0.6404	0.9157	1.0119	I/Ic avail.	0.8065
	C	99-100-0972	Ca C O3	(Calcite)	0.4115	0.8943	1.0157	I/Ic avail.	0.7523

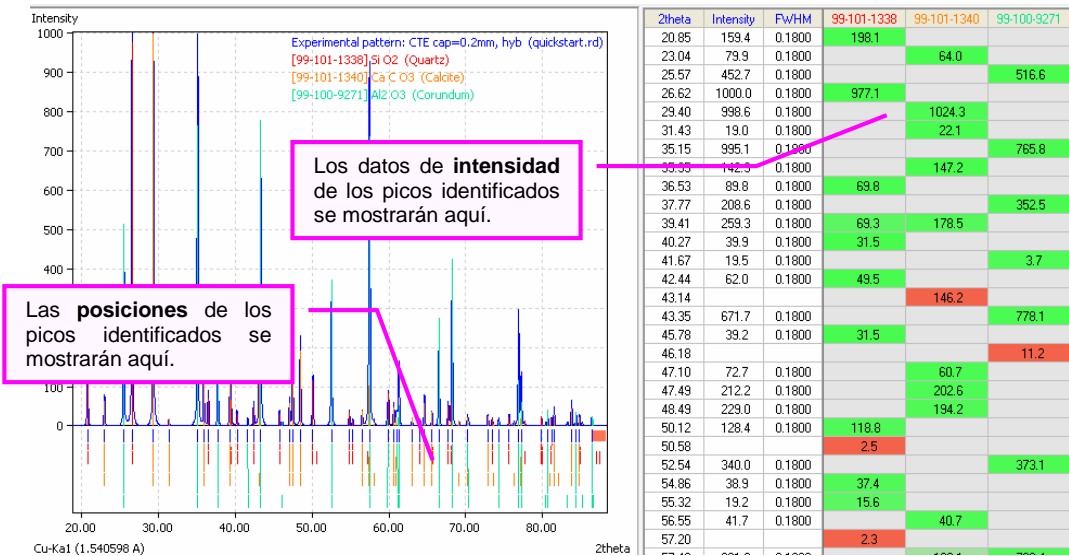
La especie corindón [99-100-9271] ha sido aceptada. Los patrones de igual especie (Corindón) desaparecen de la lista.

De nuevo vemos mas patrones en la lista y el valor de la figura de mérito “FoM” se reordena. Esta vez parece que es la calcita [99-101-1340] la que explica mejor el resto de picos. Procederemos a aceptarla. Tras esta operación veremos que no aparecen en la lista de patrones otras especies, solo las aceptadas.

Color	Qual.	Entry	Formula	Name	P(peakpos.)	P(I/I0)	I scale fct.	Quant.(%)	FoM
		--		Experimental pattern: CTE cap=0.2mm, hyb (quickstart.rd)	1.0000	1.0000	1.0000	--	1.0000
	C	99-101-1338	Si O2	(Quartz)	0.7075	0.8674	0.9771	16.5	0.8622
	C	99-101-1340	Ca C O3	(Calcite)	0.7024	0.9193	1.0243	22.0	0.8343
	C	99-100-9271	Al2 O3	(Corundum)	0.7106	0.7891	0.7781	61.6	0.8271

No hay más patrones en la lista

Aquí se mostrará un análisis semicuantitativo, si es posible.



Los datos de intensidad de los picos identificados se mostrarán aquí.

Las posiciones de los picos identificados se mostrarán aquí.


Mientras se seleccionan las especies componentes, si hay datos disponibles, se realiza un análisis semicuantitativo aproximado; en nuestro caso diríamos que nuestra muestra contiene un 16.5 % de cuarzo un 22 % de calcita y un 61% de alúmina.

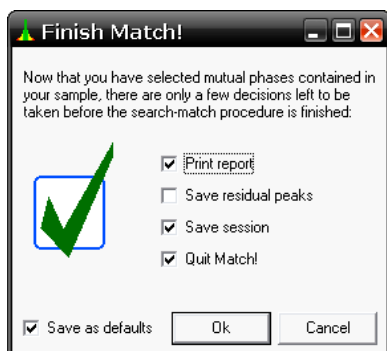
2theta	Intensity	FWHM	99-101-1338	99-101-1340	99-100-9271
20.85	159.4	0.1800	198.1		
23.04	79.9	0.1800		64.0	
25.57	452.7	0.1800			516.6
26.62	1000.0	0.1800	977.1		
29.40	998.6	0.1800		1024.3	
31.43	19.0	0.1800		22.1	
35.15	995.1	0.1800			765.8

Si observamos el área de la lista de picos veremos que según la especie seleccionada se marcan las **intensidades** de los picos de los patrones alineadas en los valores de posición 2θ mas adecuados, así los picos de los ángulos (20.85) y (26.62) corresponden al cuarzo, (23.04), (29.40) y (31.43) a la calcita y (25.57) y (35.15) al corindón.

2theta	Intensity	FWHM	99-101-1338	99-101-1340	99-100-9271
20.85	159.4	0.1800	198.1		
23.04	79.9	0.1800		64.0	
25.57	452.7	0.1800			516.6
26.62	1000.0	0.1800	977.1		
29.40	998.6	0.1800		1024.3	
31.43	19.0	0.1800		22.1	

Si se desplaza el cursor sobre el valor de la intensidad de un patrón aparecerá el **valor del ángulo del dato del patrón**. Por ejemplo colocando el cursor sobre el valor 516.6 aparece resaltado en amarillo el valor 25.58 correspondiente al ángulo del dato del pico del corindón que se cotejó para la posición experimental $2\theta = 25.57$

Finalizar el trabajo Para finalizar el trabajo pulsaremos la combinación de teclas <Ctrl+F> o el botón equivalente "Finalizar Match!" 



Desde aquí seleccione lo que quiere que realice el programa a continuación; vemos que por defecto se imprimirá un informe se salvará la sesión y se cerrará el programa. Pulsaremos OK

Para imprimir el informe tendremos que seleccionar la impresora de entre la que se encuentren instaladas, salvar la sesión con un nombre (procurando que sea adecuado p. ej. "Result_quick").

Guía detallada

El ejemplo anterior tiene como objeto mostrar la forma de trabajo con este programa, Recomendamos la lectura del manual de instrucciones y seguir la guía paso a paso ("tutorial") descrita en el documento "Manual.pdf" accesible desde el menú de ayuda.

ATENCIÓN: Téngase en cuenta que la guía usa para sus conclusiones la base de datos AMSCD, por lo que si se tiene activa la base IUCr/COD/AMSCD, una base de datos ICDD PDF o una base de datos propia del usuario, los resultados obtenidos serán diferentes. Esta advertencia debe ser tenida muy en cuenta dado que las versiones se actualizan (y mejoran) con frecuencia.



CRYSTAL IMPACT GbR
Rathausgasse 30
D-53111 Bonn
Germany

☎: +49 (228) 981 36 43
☎: +49 (228) 981 36 44
E-mail: info@crystalimpact.com
http://www.crystalimpact.com