



Факультет Химии

Базовая кафедра неорганической химии
и материаловедения Института общей
и неорганической химии им. Н.С.
Курнакова РАН

Москва
2025

Третий семинар: «Оформление данных научного эксперимента 2.0»

Научно-учебная группа
«Наноэнзимы»

Докладчик: м.н.с. лаборатории синтеза функциональных материалов и переработки минерального сырья **Попков Матвей Андреевич**



Задачи семинара:

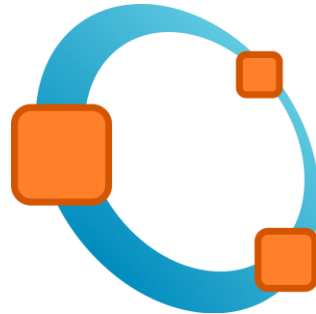
- ✓ Обзор ПО для обработки данных;
- ✓ Рентгенофазовый анализ (РФА): построение рентгенограмм, индцирование пиков;
- ✓ ИК-спектроскопия: соотнесение пиков на спектре с функциональными группами;
- ✓ Динамическое рассеяние света (ДРС): определение гидродинамического радиуса частиц
- ✓ Диджитализация изображений



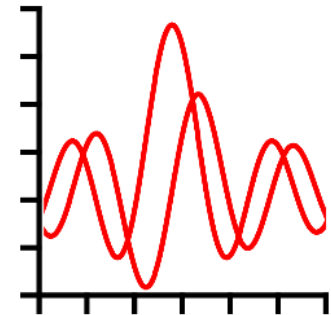
ПО для обработки данных эксперимента:



MS Excel



GNU Octave



Igor Pro





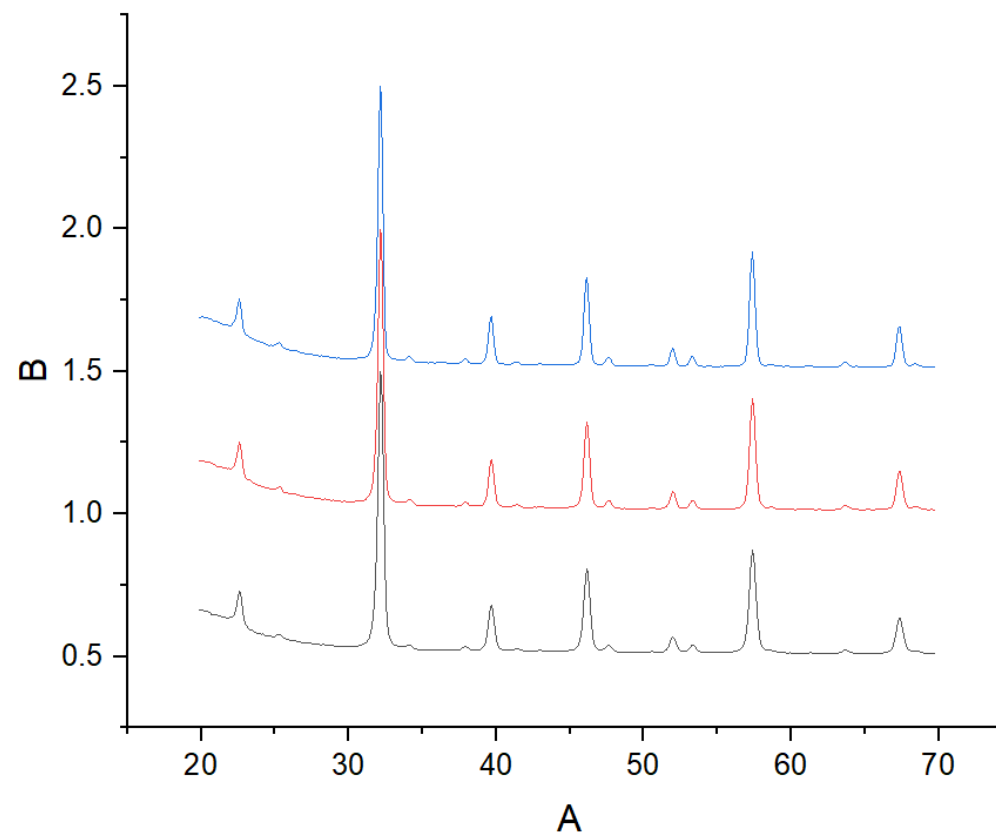
Основные возможности

Создание таблиц

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
Long Name				
Units				
Comments	LFO-700_cor	LFO-700_cor	LFO-800_cor	LFO-900_cor
F(x)=		wcol(j)/max(w	wcol(j)/max(w	wcol(j)/max(w
Sparklines				
1	19.875	0.66298	1.18792	1.68939
2	19.975	0.66298	1.18792	1.68939
3	20.075	0.6638	1.18798	1.69577
4	20.175	0.66111	1.18702	1.68895
5	20.275	0.65809	1.18389	1.68968
6	20.375	0.66123	1.17978	1.68884
7	20.475	0.65604	1.18219	1.68614
8	20.575	0.65592	1.18085	1.68242
9	20.675	0.64856	1.17799	1.68389
10	20.775	0.6483	1.17727	1.67894



Построение графиков

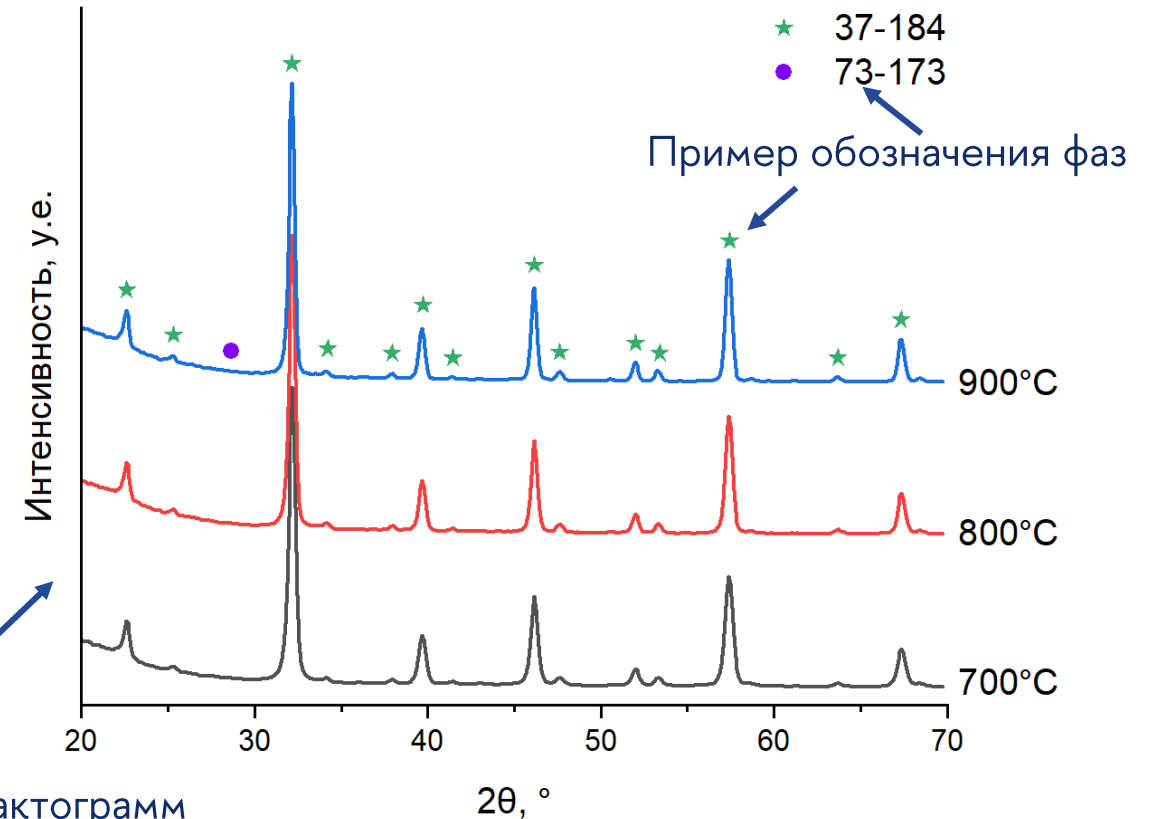


Рентгенофазовый анализ (РФА)

- Данные рентгеновской дифракции чаще всего записаны как зависимость интенсивности сигнала от угла поворота детектора (2θ);
- При построении графика необходимо нормировать интенсивность всех дифрактограмм и расположить их друг над другом;
- Важным этапом построения графика является идентификация пиков. Обозначения можно проводить с помощью специальных символом или же построением штрих-рентгенограммы.

При подобном расположении дифрактограмм
метки на шкале не ставятся

Пример оформления:

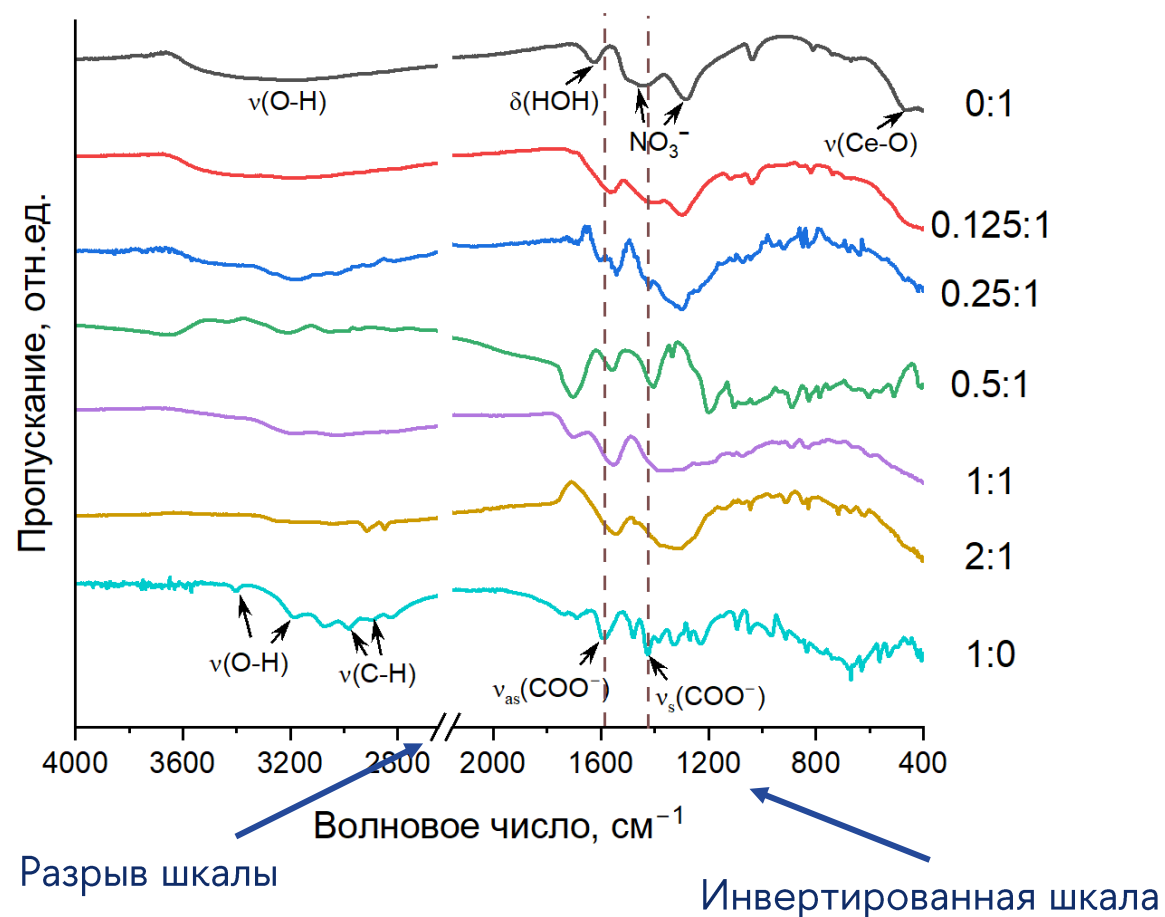


ИК-спектроскопия

- Данные ИК-спектроскопии представлены как зависимость интенсивности пропускания (или поглощения) от волнового числа (длины волны);
- По положению пиков на спектре можно определить наличие/отсутствие функциональных групп, а также их взаимодействие;
- Для наглядности пики необходимо подписывать (указывают соответствующую функциональную группу или волновое число экстремума).

Пример оформления:

Цитрат аммония:CeO₂

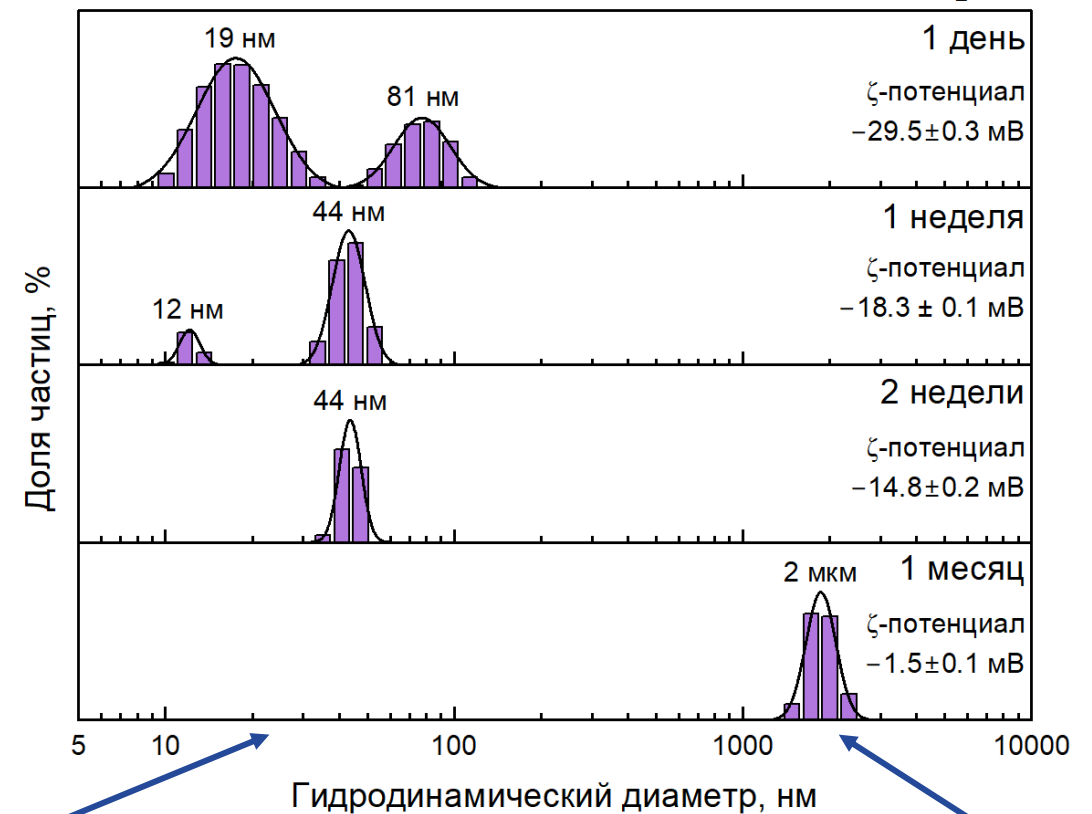


Динамическое рассеяние света

- Данные динамического рассеяния света дают понимания о распределении частиц в коллоидном растворе по размеру;
- Средний гидродинамический радиус фракции частиц может быть рассчитан с помощью функции Гаусса;
- Распределение частиц по размеру также может быть представлено в виде сводной таблицы.
- Дополнительно можно указывать величину поверхностного заряда частиц

Пример оформления:

Аскорбат натрия:CeO₂ 1:1



Логарифмическая
шкала

Математическое
описание пика

Диджитализация изображения

