



HighScore 소프트웨어

결정상 식별부터 Rietveld 분석까지, 단일 스캔부터 매개변수 정밀화까지 제공



HighScore 소프트웨어

유연함을 염두에 둔 설계

프로세스 제어 개선에 관심이 있든, 연구 및 개발에 관심이 있든, 물질에 대한 이해는 보통 XRD 분말 회절 패턴을 이해하는 데서 시작됩니다. 기술을 한계까지 사용하든 정기 평가 절차를 수립하든, HighScore 제품군은 언제나 고객의 요구 사항을 충족시킵니다.

HighScore 제품군은 HighScore, Plus 옵션, RoboRiet, 이 3개의 모듈로 구성되어 있습니다.

HighScore는 프로파일 피팅 기능을 갖춘 종합 결정상 식별 프로그램이지만 Plus 옵션은 Rietveld 피팅, 결정학 및 확장 군집 분석 등 추가 기능을 제공합니다. RoboRiet은 자동화 환경에서 자동 분석을 수행합니다.

전 세계적으로 분말 회절 커뮤니티의 여러 노력 덕분에 분말 패턴의 데이터베이스가 빠르게 성장하고 있으며, 분말 패턴 검색 일치 분석의 범위가 확대되고 있습니다.

또한, 부분 최소 제곱 회귀(PLSR)와 같은 새로운 통계 방법이 등장하여 물질의 재현성 및 품질 관리에 대한 신속하고 표적 분석을 제공합니다.

HighScore는 포괄적인 도움말 파일, 지원 자료, 교육 및 훈련에 대한 기회를 제공합니다.

질문에 답변해 드릴 수 있는 현지 응용 전문가가 가까이에 있으므로 멀리서 도움을 요청할 필요가 없습니다.



가장 포괄적인 분말 회절 소프트웨어

당사는 HighScore 제품군을 지속적으로 혁신하고 업데이트하여 XRD에 맞는 가장 포괄적이고 사용자 친화적인 도구 모음을 제공합니다.

사용자는 다음과 같은 혜택을 누릴 수 있습니다.

- 단일 사용자 인터페이스 내에 모든 작업 완벽 통합
- 강력한 검색 일치 알고리즘
- 참조 데이터베이스 동시 사용
- 기록 및 여러 데이터세트가 포함된 문서 기반 구조
- 자동 분석
- 자동 보고
- 3가지 모델 기능 및 옵션에 맞는 최첨단 프로파일 피팅
- 자체 학습을 위한 포괄적인 도움말 시스템 및 자습서
- XRDM, 모든 주요 공급업체의 텍스트 및 2진법 스캔 파일 형식을 통한 데이터 교환

HighScore

결정상 식별 등을 위한 전체 패턴 접근법

물질 내 결정성 성분 측정:

상식별

서치 매치(Search-match)

피크 및 프로파일 데이터를 결합하고 기준 후보 목록의 점수를 즉시 다시 매기는 강력한 검색 일치 알고리즘입니다.

자동 식별

정교한 필터를 사용하여 후보에 가장 적합한 항목을 자동으로 수락할 수 있습니다.

화학 계산기

화학 계산기는 결정상 화학을 단순한 원소, 산화물, 황화물 또는 기타 화합물로 분해합니다. 이는 단일상 또는 알려진 결정상 농도의 결정상 혼합에 사용할 수 있습니다.

참조 데이터베이스

사용자가 만든 데이터베이스를 포함하여 모든 참조 데이터베이스를 지원합니다.

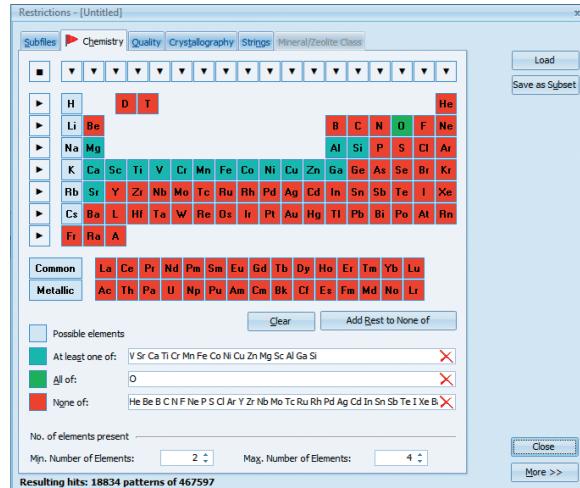


그림 1. 주기율표에서 화학 원소의 선택 예.

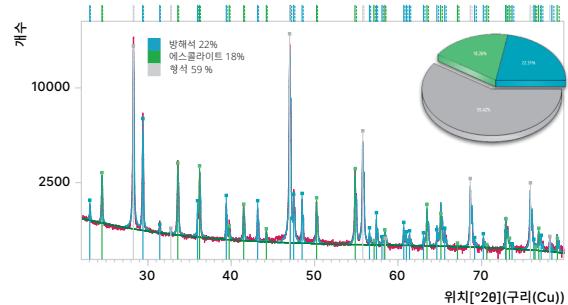
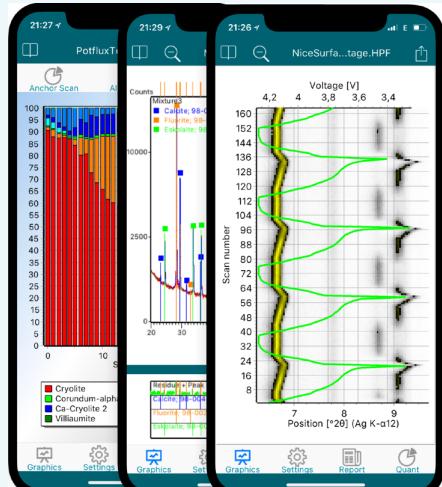


그림 2. 광물 혼합물의 상식별. 모든 결정상은 색상으로 코딩되고, 해당 피크는 해당 마커와 함께 표시되므로 가독성이 높습니다. 반정량화는 기준 강도 비율로 수행됩니다.



HSVU: 세계 최초의 X선 분말 회절 앱

- 모든 종류의 X선 회절 스캔을 다양한 형식으로 표시
- Malvern Panalytical의 HighScore 소프트웨어에서 실시한 X선 회절 분석의 모든 세부 사항을 표시하고 보고
- 이메일 계정에서 스캔 또는 회절 분석 열람 가능
- Dropbox, Facebook, 이메일을 통해 친구와 분말 회절 데이터 공유 가능
- HighScore 분석 문서의 세부 정보 보고



숨겨진 정보 또는 상관 관계 탐색:

부분 최소 제곱 회귀(Partial least squares regression) 방법

HighScore의 부분 최소 제곱 회귀(PLSR) 방법:

- 사용자 친화적
- 데이터를 실제 보정과 비교하고 샘플 모델의 긴 시뮬레이션과 피팅이 필요하지 않는 진정한 통계적 접근 방식
- 측정된 데이터와 관심 샘플의 직접적인 상관 관계를 신속하게 파악

그림 3에 나와 있는 것처럼, PLSR 방법은 습식 화학에 비해 상당한 시간 절약 효과를 제공하며 신뢰성이 높습니다.

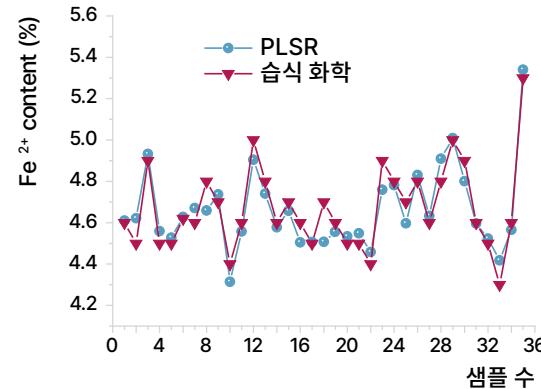


그림 3. 일련의 미네랄 샘플에서 Fe^{2+} 함량을 측정하기 위한 습식 화학과 PLSR 방법 간 비교[1].

미세 조직 조사:

변형 및 결정자 크기 분석

결정질 물질의 미세조직에 대한 정보는 X선 단일 피크 프로파일의 폭과 모양을 통해 얻을 수 있습니다. 분석하기 전에 HighScore는 피크 폭 확장의 장비의 영향을 교정할 수 있습니다.

결과는 각 피크에 대한 미세 변형 및/또는 결정자 크기 정보입니다. 피크가 여러 개인 경우 윌리엄슨-홀(Williamson-Hall) 플롯을 평균 값[2]과 함께 표시할 수 있습니다.

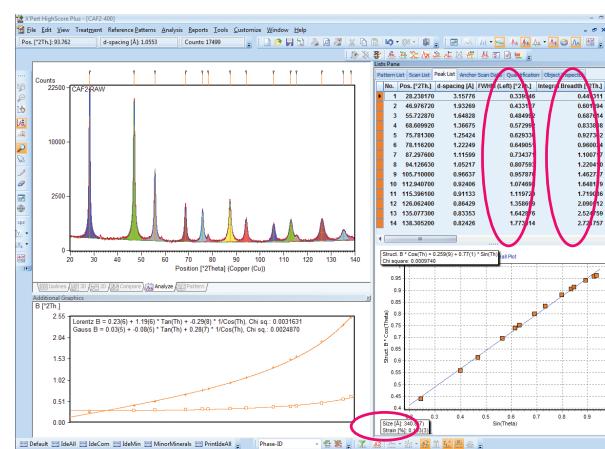


그림 4. 피팅된 프로파일과 피크 목록(반치전폭(FWHM) 및 적분 폭 포함, 상단)과 가우스 및 로렌츠 폭 확장 기여도를 보여주는 윌리엄슨-홀(Williamson-Hall) 플롯(하단).

무질서 및 국소 구조에 대한 통찰력 확보:

쌍 분포 함수(Pair distribution function)

감소 구조 함수와 그에 상응하는 원자 쌍 분포의 도출이 통합되어 쉽게 분석할 수 있습니다.

몇 번의 클릭만으로 다음 사항을 수정할 수 있습니다.

- 흡수율
- 제동 복사
- 콘프턴 및 다중 산란
- 로렌츠 편광

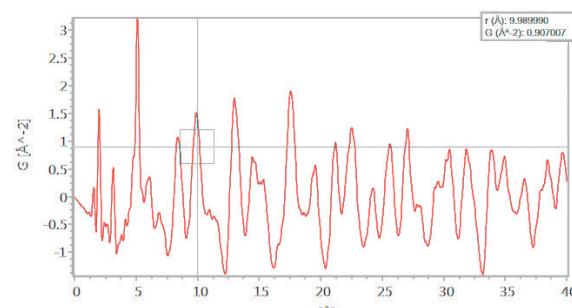
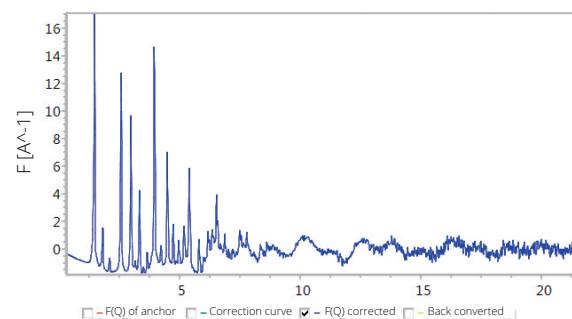


그림 5. a) 실온에서 측정한 $\text{Zn}(\text{CN})_2$ 의 축소 구조 함수, b) HighScore에서 계산한 해당 원자쌍 분포 함수.

[1] U. König, T. Degen, N. Norberg, Powder Diffraction 29 (S1), pp 578-583 (2014)

[2] G.K. Williamson, W.H. Hall, Acta Metall. 1, 1953, pp 22-31

빅 데이터 처리:

군집 분석

현대적인 X선 회절 장비를 사용하면 신속한 측정이 가능하여 많은 양의 데이터를 분석할 수 있습니다. 데이터 평가를 처리하는 가장 좋은 방법은 유사한 데이터 세트를 식별 및 그룹화하고 가장 대표적인 데이터 세트를 선택하는 동시에 이상치를 식별하는 것입니다.

HighScore에 구현된 군집 분석 도구를 통해 이 분석을 쉽고 원활하게 수행할 수 있습니다.

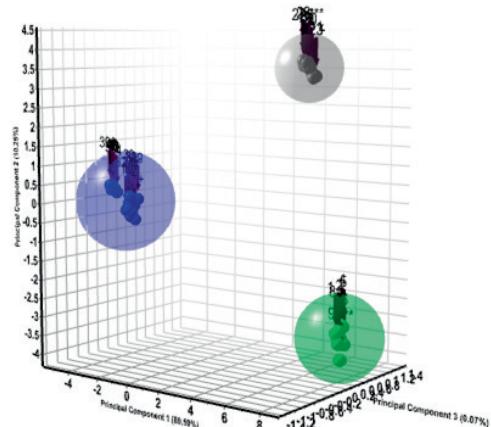


그림 6. 서로 다른 출처의 비산회 원료의 군집 분석.

중첩된 회절 피크 분리:

프로파일 피팅

피크 매개변수의 측정 개선을 위해 프로파일 피팅은 심하게 중첩된 회절 피크를 분리할 수 있도록 합니다.

추출 가능 매개변수 개선:

- 직위
- 강도
- 너비
- 입형

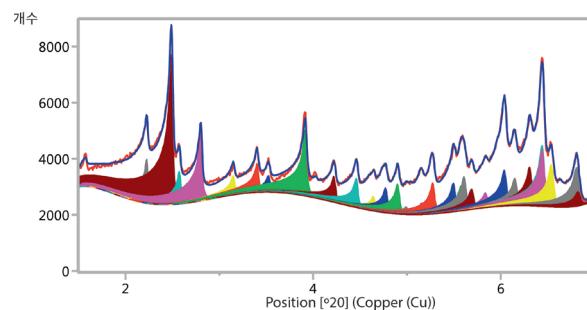


그림 7. 미세결정 리소자임 샘플의 프로파일 피팅.

유용한 정보:

- 미세결정 크기
- 미세 변형

분말 회절 패턴의 디지털화:

비트맵-스캔 변환기

스캔 그림을 원시 데이터로 빠르고 쉽게 변환할 수 있는 도구입니다.

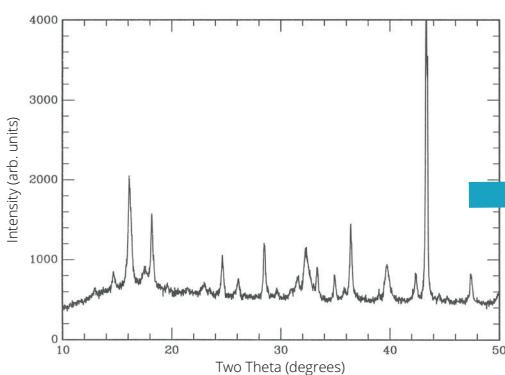


그림 8. 자유의 여신상에서 녹슨 부분 샘플의 X선 회절 패턴 원본 그래프, 출처: *Powder Diffraction* 1, 299 (1986) [3].

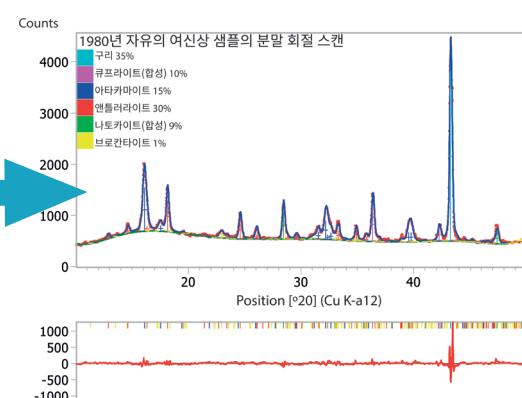


그림 9. 변환된 스캔에 대한 Rietveld 정밀화.

HighScore와 Plus 옵션

결정 분석 등에 이상적인 도구

HighScore에 Plus 옵션을 추가하면 단위 셀 정밀화, PLSR, 결정 및 미세구조 분석, PONKCS 결정상 정량화, 프로파일 피팅 및 결정상 식별, 사용자 친화적 패키지에 통합된 기타 다양한 도구를 포함하는 진정한 올인원 패키지를 얻을 수 있습니다.

구조 분석 및 정량화의 경우:

Rietveld 및 Pawley, PONKCS

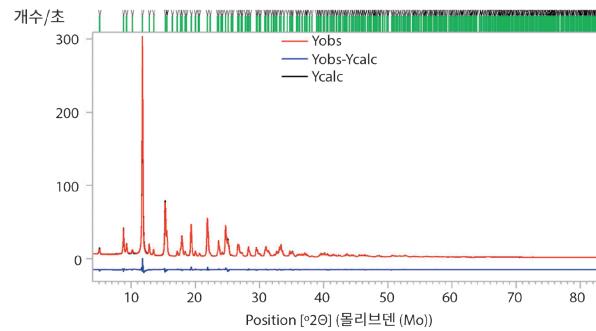


그림 10. HighScore Plus를 사용하여 Mo K α 파장으로 측정한 $\text{Fe}(\text{IO}_3)_3$ 의 Rietveld 정밀화.

Rietveld 방법은 측정된 회절 프로파일과 계산된 프로파일을 비교하고 매개변수 범위를 변화시켜 두 프로파일 간의 차이를 최소화합니다(그림 10 참조). 표준 Rietveld 정밀화에는 각 결정상에 대한 원자 위치, 공간군 및 단위포의 매개변수가 필요합니다.

Malvern Panalytical의 Rietveld 알고리즘은 널리 수용되고 입증된 기술의 고급 구현으로, 지난 수십 년간 지속적으로 발전해 왔습니다.

Rietveld 커널을 이용한 데이터 피팅은 다음과 같은 방법을 사용하여 크게 개선되었습니다.

- 막 변위 및 막 두께 모델
- K-에지(K-edge)와 백색 방사선을 포함한 전체 방출 스펙트럼에 대한 설명
- 하나의 모델을 유사한 여러 스캔에 피팅할 수 있는 64비트 기술 및 병렬 피팅 모드

그림 3에 나와 있는 것처럼, PLSR 방법은 습식 화학에 비해 상당한 시간 절약 효과를 제공하며 신뢰성이 높습니다.



새 결정상:

인덱싱 및 공간 그룹 결정

HighScore와 Plus 옵션에는 가장 인기 있고 강력한 인덱싱 프로그램이 통합되어 있습니다.

- Dicvol
- Treor
- ITO
- McMaille

Extinction Symbol	Log Probability Score	Long Herman Ma...	Space grou...	Frequency Inorg...
hbPn--	74.4084			6895
	74.4084 P 4/n		85	481
	74.4084 P 4/n m m		129	6414

그림 11. Le Bail 또는 Pawley 피팅을 수행한 후, 몇 번의 클릭만으로 최신 알고리즘인 ExtSym을 사용해 가능한 공간 그룹을 결정할 수 있습니다.

데이터 처리 속도 향상:

자동 데이터 처리

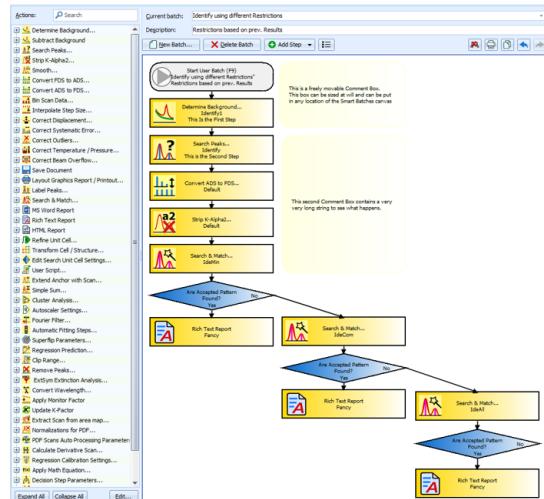
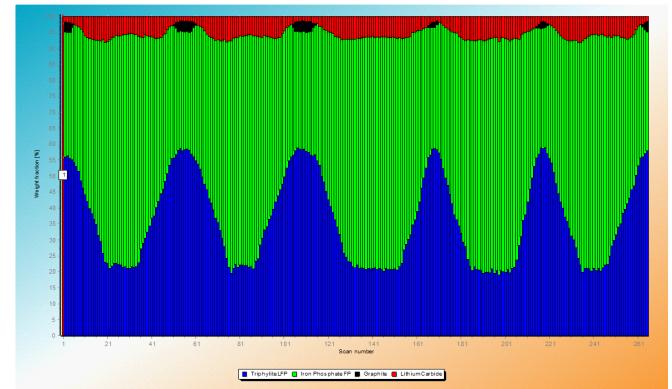


그림 12. 자동화를 빠르게 구성하기 위해 미리 정의된 매개변수나 사용자 지정 매개변수를 가진 동작을 왼쪽의 동작 목록에서 끌어와 흐름도에 추가하거나 삽입할 수 있습니다.

모든 유형의 데이터 분석은 사용자 배치에서 자동화될 수 있으며, 몇 번의 스캔 횟수를 실행됩니다. 배치 편집은 미리 정의된 프로세싱 단계와 맞춤형 프로세싱 단계를 쉽게 끌어다 놓을 수 있는 순서도에서 수행합니다. 여기에는 결정단계(조건부 분기)가 포함될 수 있습니다. 배치에 대한 예시가 그림 12에 제시되어 있습니다. 막대 그래프 그림은 4개 위상의 정량화를 통해 배터리 충전-방전 실험의 자동 분석 요약 결과를 보여줍니다.



프로세스 제어 외 더 많은 기능: 산업 응용 분야

모든 HighScore(Plus) 기능은 자동으로 실행되며 무인 실행이 가능합니다. 배치 프로그램에는 데이터 처리 및 분석 기능의 모든 시퀀스가 포함될 수 있습니다. 스크립팅은 랙 정보 관리 시스템(LIMS)에 대한 전용 출력을 제공하는 데 사용할 수 있습니다.

또 다른 버전의 소프트웨어인 RoboRiet은 생산 환경에서 사전에 프로그래밍된 Rietveld 분석을 실행합니다. 새로운 측정을 자동으로 감지하고 결과를 프린터, 디스크 드라이브, Excel 목록 또는 LIMS 시스템에 직접 전달합니다.

규정 준수 보장

이제 HighScore를 규제 환경에 대한 완벽한 솔루션인 OmniTrust와 함께 사용할 수 있습니다. OmniTrust는 사용자가 워크플로에 필요한 감사 가능한 작업만 수행할 수 있도록 하여 기록 정확성과 데이터 무결성을 보장합니다.

시스템 제어는 사용자가 오류를 방지하고 데이터 위치를 방지하여 USFDA의 21 CFR Part 11을 비롯한 모든 현행 규제 지침을 준수할 수 있도록 도와줍니다.





Malvern Panalytical 소개

Malvern Panalytical은 재료 및 생명 과학 분석 분야의 글로벌 리더로, 작은 것에 숨겨진 힘을 끌어내어 고객이 더 큰 목표를 달성할 수 있도록 돕습니다.

Malvern Panalytical의 비전은 더 깨끗하고 건강하며 생산적인 세계를 만드는 것입니다.

정밀 측정, Malvern Panalytical의 전문 지식, 신뢰할 수 있는 데이터, 통찰력을 통해 고객과 협력하여 고객 솔루션을 구현합니다.

당사의 임직원은 발견의 동반자입니다. 임직원 간 협력 및 고객과 협력을 통해 새로운 가능성을 발견하고 혁신을 만들어냅니다.

Malvern Panalytical에는 당사의 가치에 기반하여 건강하고 높은 성과를 추구하는 문화가 있습니다. 그 가치란 주인 의식을 갖고(Own it), 높은 목표를 추구하며(Aim High), 진실하게 행동하는 것(Be True)입니다.

2030년까지 사내에서, 2040년까지 전체 가치 체인에서 넷 제로(net zero)를 달성하기 위해 노력하고 있습니다.

세계를 선도하는 정밀 측정 그룹 Spectris plc의 일원인 Malvern Panalytical에는 2,300명 이상의 임직원이 소속되어 있습니다.

Malvern Panalytical. 당사는 작은 것에도 진심입니다(We're big on small™).

서비스 및 지원

Malvern Panalytical은 최고 수준의 분석 프로세스를 지속적으로 추진하는 데 필요한 글로벌 교육, 서비스 및 지원을 제공합니다. Malvern Panalytical은 투자 수익을 늘릴 수 있도록 도와드리며, 증가하고 있는 분석 요구 사항에도 확실하게 여러분을 지원해 드립니다.

Malvern Panalytical의 전 세계 전문가로 구성된 팀이 응용 분야의 전문성, 신속한 대응 및 기기 최대 가동 시간을 보장함으로써 비즈니스 프로세스에 가치를 더해 드립니다.

- 선제적인 협력 및 원격 지원
- 전체 또는 유연한 서비스 계약
- 규정 준수 및 검증 지원
- 현장 또는 강의실 교육 과정
- 원격 교육 과정 및 웹 세미나
- MyStore 및 My Customer Support Portal을 포함한 디지털 서비스
- 시료 분석, 방법 개발 및 적용 컨설팅



Malvern Panalytical

Grovewood Road, Malvern,
Worcestershire, WR14 1XZ,
United Kingdom

전화 +44 1684 892456

Lelyweg 1,
7602 EA Almelo,
네덜란드

전화 +31 546 534 444

www.malvernpanalytical.com

면책사항: 본 자료에 포함된 정보가 정확할 수 있도록 최선을 다했으나, 본 문서의 어떤 것도 이러한 정보의 정확성, 유통률 또는 완전성에 대해 표기이나 보충의 의미하는 것은 아니며, Malvern Panalytical은 본 문서에 포함된 오류나 이 자료의 사용과 관련한 손상에 대해 책임을 지지 않습니다. Malvern Panalytical은 언제든 고지 없이 본 자료의 내용을 변경할 권리를 보유합니다.
저작권: © 2024 Malvern Panalytical. 이 저작물 또는 그 일부는 당사의 서면 허가 없이 복사하거나 전송할 수 없습니다. PN12920