

Программа качественного фазового анализа "PHAN".

Программа предназначена для проведения качественного фазового анализа по рентгеновским спектрам для образцов с **известным химическим составом**. Однако, в случае необходимости возможно вести фазовый анализ и без указания химического состава образцов. Программа позволяет работать как с экспериментальным спектром, полученном съемкой по точкам на автоматизированном дифрактометре, так и с набором линий спектра, измеренных вручную по диаграммной ленте потенциометра при съемке на запись.

Ввод экспериментального спектра осуществляется в подпрограмме F3. При этом помимо спектра необходимо вводить файл с линиями, записанный в подпрограмме **отбора линий** программы начальной обработки спектра OUTSET. В подпрограмме **ввод файла – F3** указывается имя вводимого файла в виде:

A:SPECTR1.TXT или B:SPECTR1.TXT
или A:*.TXT
или C:\SPECTRS\SAMPLE.TXT и т.п.

При этом действуют все допустимые DOS правила и ограничения. Например, при указании имени файла в виде *.* будет приведен список всех файлов активной директории. Важное значение имеет первая буква расширения имени файла – по ней определяется тип файла. Так, если первая буква расширения L (SAMPLE.LIN) – то указанный файл считается файлом с линиями, если первая буква расширения T (SAMPLE.TXT), то файл содержит экспериментальные импульсы, набранные при съемке в каждой точке.

В фазовом анализе участвуют фазы заданного пользователем химического состава образца. При указании химических элементов допустимы некоторые обобщения. Обозначение **Ln** подразумевает, что поиск ведется среди всех лантаноидов, обозначение **An** включает в анализ все актиноиды. Аналогично, можно включить в анализ фазы, содержащие все щелочные элементы (нужно указать Li*) или все переходные металлы VIII подгруппы (указывается Fe*). При этом включаются элементы, расположенные в соответствующей подгруппе ниже указанного со звездочкой элемента (включая его самого). Обобщение по химическому составу оказывается полезным в случае, когда в предыдущем поиске не удалось найти подходящей фазы. Тогда имеет смысл повторить поиск по системам-аналогам, скажем, в сплавах лантаноидов часто встречаются метастабильные фазы, образующиеся в системах с другими лантаноидами, причем периоды изоструктурных фаз часто очень близки. То же самое возможно и в системах с участием переходных металлов, однако здесь задача усложняется значительной разницей в периодах решетки изоструктурных фаз. Помимо основных элементов для образца могут быть дополнительно указаны и примесные элементы, возможно указание в качестве примесных элементов **всех** элементов Периодической таблицы (вместо списка элементов указывается значок «*»).

Каждая фаза имеет метку, указывающую природу данного соединения. Метка «**I**» (inorganic) указывает на то, что данное соединение относится к классу неорганических, а метка «**O**» указывает на принадлежность к органическим соединениям. Группа природных минералов имеет метку «**M**» (mineral), интерметаллиды и соединения металлов с углеродом, бором и азотом имеют метку «**A**» (alloy). Данные по ряду фаз из первых томов картотеки были уточнены в более позднее время и также помещены в картотеку. При этом данные из первых томов получали метку «**D**» (deleted), чтобы иметь возможность исключать их из рассмотрения при рядовом фазовом анализе. Однако, полное удаление этих карточек из картотеки нецелесообразно, поскольку в них может содержаться полезная информация, накопленная за годы развития рентгеноструктурного анализа. Для специальных ситуаций,

когда известно, что проба является чистым элементом, предусмотрена метка «E» (element). Кроме того, имеется довольно многочисленная группа фаз, рассчитанных по программе SPECTRUM (см. более подробно ниже). Этим фазам присвоена метка «S».

При фазовом анализе можно включать только часть карточек соответствующей химической природы. Для этого предусмотрено два способа: включить соединения данной природы или не включать соединения данной природы. Так обозначение «IMoad» показывает, что будут включаться неорганические соединения и минералы, при этом будут игнорироваться карточки от сплавов, органических соединений и удаленные. Т.е. большие буквы указывают на включение данного признака, а малые – на его подавление. Использование такой системы необходимо, поскольку ряд карточек имеет две метки: например, соединение Mo (C O O H) будет иметь метку IO (смешанная неорганически-органическая природа соединения). Использование "меток" особенно полезно при фазовом анализе образца с неизвестным химическим составом. Однако необходимо отметить, что в этом случае удастся найти только "основные" фазы (т.е. те, содержание которых в образце максимально). Для полного анализа желательно указание химического состава.

Качественный фазовый анализ осуществляется в два этапа. На начальном, **предварительном**, этапе из всех фаз требуемого состава отбираются те, вхождение которых в образец представляется пользователю (или программе) весьма вероятным. Предварительный анализ может осуществляться в одном из трех режимов: визуализированном, автоматическом и комбинированном. На этапе **окончательного отбора**, из числа предварительно отобранных фаз пользователь в визуализированном режиме выбирает фазы по наилучшему совпадению их штрих-диаграмм с линиями экспериментального спектра. В завершении производится расшифровка линий экспериментального спектра, т.е. каждой из них ставятся в соответствие все линии окончательно отобранных фаз в пределах допуска Δd (см. ниже). Результаты такой расшифровки печатаются на экран, на принтер или в текстовый файл. Экспериментальные линии, не получившие объяснения, остаются в одиночестве.

При визуализированном режиме предварительного отбора фаз производится сравнение штрих-диаграмм фаз с графиком экспериментального спектра на экране дисплея и отбираются хорошо совпадающие фазы. При отсутствии экспериментального спектра он имитируется, при этом форма линии описывается лоренцианом 1, 2 или 4 степени (обычно указывается степень 2). Если фаза может присутствовать в образце пользователь нажимает клавишу «Y» – «Yes», если, по мнению пользователя, данной фазы нет, то нажимается клавиша «N» – «No». Отобранные пользователем фазы запоминаются, а их штрих-диаграммы остаются на экране в виде цветных штрихов. Активная фаза, то есть фаза, название которой указывается в верхней строке экрана, всегда показывается красным цветом. Визуализированный отбор, в принципе, может проводиться и без предварительно отобранных линий в экспериментальном спектре, но тогда *невозможна окончательная печать результата фазового анализа*, при котором каждой экспериментальной линии ставится в соответствие линия какой-либо фазы (см. ниже). Кроме того, визуализированный режим предварительного анализа – весьма утомительная процедура.

Гораздо производительнее автоматический способ предварительного отбора, который включает в себя три различных критерия для отбора фаз. (**Автоматический анализ требует обязательного ввода файла с линиями!**). В *первом* указываются **пороговая относительная интенсивность зачетных линии фазы В** (по умолчанию $V=20\%$). На этапе предварительного отбора среди фаз, удовлетворяющих заданному химическому составу, отбираются те, у которых линии с относительной интенсивностью $\geq V\%$ имеют в пределах допуска Δd (см. ниже) какую-либо линию в экспериментальном спектре сколь угодно малой интенсивности. Другими словами, все линии некоторой фазы, относительная интенсивность

которых выше порога $V=20\%$, должны совпадать с экспериментальными, иначе эта фаза отбрасывается. Для того, чтобы отобрать фазы, количество которых мало (то есть на спектре присутствуют лишь самые сильные линии), нужно поднимать пороговое значение V . При значении порога $V=70\div 80\%$ на предварительном этапе будут отобраны все фазы, самые сильные линии которых попали на какую-либо линию экспериментального спектра. Т.е. при повышении порога мы «смягчаем» условия поиска, что приводит к увеличению числа фаз, отобранных в соответствии с этим критерием.

В качестве второго критерия указывается **допустимый коэффициент ослабления экспериментальных линий R** . Это означает, что будут отобраны только те фазы, у которых линии с относительной интенсивностью $P\%$ попадают на линии в спектре с относительной интенсивностью больше $P/R\%$. Таким образом можно отсеять фазы, у которых сильные линии попадают на слабые экспериментальные отражения и которых (в отсутствие текстуры) не может быть в данном образце. Например, при указании $R=1$ будут отбираться только те фазы, у которых линии с интенсивностью 100% попадают на экспериментальные линии с 100% -интенсивностью. Это значение является наиболее «жестким» условием отбора фаз и по сути позволяет найти только фазу, дающую на спектре самую сильную линию. Для «смягчения» условий отбора и увеличения числа отбираемых фаз параметр R необходимо повышать.

Затем указывается допустимое окно несовпадения с экспериментальными линиями в виде

$$\Delta d = c \cdot d^n,$$

где d – межплоскостное расстояние в ангстремах, степень $n=0,1,2,3,4$ позволяет сделать ширину окна быстро возрастающей к малым углам 2θ , или большим d (при $n=0$ полуширина окна $\Delta d=c$ и постоянна, при $n=1$ постоянно отношение $\Delta d/d=c$), c – определяемая пользователем константа, ее значение обычно $c=0.003\div 0.005 \text{ \AA}$). В программе предусмотрена оптимизация коэффициента c при заданной степени n для наилучшего соответствия ширины линий в спектре фазы и экспериментального спектра (этот режим включается при указании вместо значения c знака «*»). Это необходимо для хорошей срабатываемости третьего критерия отбора фаз. Необходимо отметить, что в случае узких линий спектра при оптимизации может получаться чрезвычайно малое значение коэффициента $c=0.001 \text{ \AA}$. При поиске с таким окном экспериментальные и табличные межплоскостные расстояния могут отличаться на не более чем на 0.004 \AA при $d=2 \text{ \AA}$, что подчас оказывается чересчур жестким требованием из-за недостаточной точности измерения межплоскостных расстояний. При отсутствии специальной юстировки дифрактометра точность определения межплоскостных расстояний при $d \sim 2 \text{ \AA}$ – величина порядка 0.005 \AA . Кроме того, при широкой области гомогенности фазы экспериментальные межплоскостные расстояния могут значительно отличаться от табличных. Несмотря на все сказанное, для улучшения работы третьего критерия лучше использовать оптимизацию параметра c , а для его коррекции использовать специальную подпрограмму (см. ниже.)

Третий и главный критерий при отборе основных фаз – полное и локальное перекрытие экспериментального спектра со спектром фазы. Экспериментальный спектр имитируется набором отобранных в программе OUTSET линий (для линий указывается высоты и ширина на половине высоты), аппроксимируемых лоренцианами 2-ой кратности. Штрих-диаграммы фазы размываются также лоренцианами 2-ой кратности, при этом интегральная интенсивность (площадь) линии пропорциональна высоте штриха, а ширина линий задается окном допуска Δd . Как было сказано выше, для хорошей срабатываемости критерия желательно, чтобы ширины линий в спектре фазы и экспериментального спектра были близки.

Расчет перекрытия двух спектров основан на расчете скалярного произведения (Φ, F) , понимаемого в смысле функционального анализа, т.е.

$$(\Phi, F) = \int \Phi(x) \cdot F(x) dx.$$

Полное S_i и локальное S_l перекрытие экспериментального спектра $\Phi(x)$ и спектра фазы $f(x)$ это нормированные скалярные произведения:

$$S_i = \frac{(\Phi, f)}{\sqrt{(\Phi, \Phi) \cdot (f, f)}}, \quad S_l = \frac{(\Phi, f)}{\sqrt{(\tilde{\Phi}, \tilde{\Phi}) \cdot (f, f)}}.$$

Если Φ и f понимать как два вектора, то S_i выступает в роли косинуса угла между ними. В том случае, если $\Phi(x)=f(x)$ имеем $S_i=1$. Если же все линии спектра фазы "падают в молоко", т.е. ложатся между линий экспериментального спектра и далеко от них, то $(\Phi, f)=0$ и $S_i=S_l=0$. При нормировке локального перекрытия использована функция $\tilde{\Phi}(x)$ вместо функции $\Phi(x)$. В функции $\tilde{\Phi}(x)$ учтены только те линии экспериментального спектра, центры тяжести которых находятся не более чем в двух окнах допуска от какого-либо штриха штрих-диаграммы фазы.

Как правило, степень локального перекрытия выше степени полного перекрытия. Если необходимо отключить эти параметры, то соответствующие значения должны быть равны нулю. В случае однофазных спектров величина локального перекрытия $S_l=0.7 \div 0.8$, т.е. задание высокой степени локального перекрытия позволяет сразу же находить основную фазу, входящую в данный образец даже при неизвестном элементном составе образца. Локальное перекрытие оказывается полезным и при анализе многофазных образцов, т.к. учитывает совпадение экспериментального спектра со спектром фазы лишь в области существования линий последнего. В этом случае полное перекрытие следует задавать невысоким, но требовать чтобы выполнялось $S_i \geq 0.7 \div 0.8$.

Отобранные основные фазы упорядочиваются по линейной комбинации $W_i \cdot S_i + W_l S_l$ с суммой весов $W_i + W_l = 1$, а W_i задается пользователем.

В многофазном образце после того, как найдены **n основных фаз** следует переходить к повторному предварительному отбору в режиме **поиска дополнительных фаз**. В этом режиме для каждой новой (n+1)-ой фазы производится минимизация функции рассогласования экспериментального спектра и линейной комбинации размытых штрих-диаграмм фаз:

$$U(y) = \int \left[\Phi(x) - \sum_{i=1}^{n+1} y_i \cdot f_i(x) \right]^2 dx,$$

где $\Phi(x)$ – экспериментальный спектр, $f_i(x)$ – спектр i -той фазы, y_i – оптимизируемые коэффициенты (псевдообъемные доли фаз).

Отбор *дополнительной* фазы происходит, если при добавлении новой (n+1)-ой фазы имеет место снижение U_{\min} по отношению к U_{\min} для системы из n фаз выше установленного порога, например, на 10 % и более. Отобранные дополнительные фазы упорядочиваются по относительному снижению функции рассогласования спектров. В этом режиме могут быть обнаружены фазы с объемными долями порядка 5 % и более.

Для обнаружения фаз, содержание которых мало, в программе предусмотрена специальная подпрограмма **преобразования имитированного спектра Alt/F8**. Если выполнить **изменение высоты линий**, искусственно повысив интенсивность слабых линий, то функция $U(y)$ будет изменяться на большую величину при точном попадании линий фазы на слабые экспериментальные линии. Искусственное изменение интенсивностей производится на

имитированном спектре, по которому и осуществляется автоматический поиск фаз. Пользователь задает величину уровня, **до которого повышается нулевая интенсивность – X %**. Интенсивность линии при преобразовании меняется от A % до величины $X + A \cdot (100 - X) / 100$. Т.е. если задано значение X=30%, то при этом линия с относительной интегральной интенсивностью 0 % повысится до 30 %, линия с интенсивностью 100 % не изменится, а линия с относительной интенсивностью 10 % возрастет до величины 37 %.

В подпрограмме преобразования имитированного спектра можно также произвести **изменение ширины линий**, что позволит повысить ширину окна допуска Δd . Если после этого в предварительном отборе фаз выполнить подбор коэффициента **c**, задающего ширину окна допуска, то можно увеличить окно допуска при сохранении наилучшего соответствия ширин линий в спектре фазы и экспериментального спектра.

Режим **комбинированного** анализа сочетает в себе автоматический и визуализированный способы отбора фаз. Фазы отбираются как и в автоматическом режиме исходя из заданных пользователем окна несовпадения и пороговыми значениями. Штрих-диаграммы прошедших отбор фаз накладываются на экспериментальный спектр, предоставляя пользователю отобрать или отбросить фазу нажатием клавиш Y или N.

Программа работает с большим банком фаз (более 110 000 карточек). Фазы, входящие в банк получены из нескольких источников. Примерно $\frac{3}{4}$ фаз взяты из картотеки JCPDS (ASTM), куда входят тома 1÷47 (примерно до 1997 года). Кроме того банк содержит более 30000 расчетных фаз. Расчет выполнен по программе SPECTRUM на основании информации о структуре и периодах фаз из справочника Pearson's Handbook. Pearson's Handbook содержит сведения о 20000 интерметаллидов, фаз внедрения, окислов, а также соединениях с серой, фосфором и их аналогами. Источником информации о структуре фаз, а также о межплоскостных расстояниях и интенсивностях отдельных фаз служила также и периодическая литература (в частности, журналы "Кристаллография", "Less-Common Metals", "Acta Crystallographica" и др.). Часто расчетные фазы оказываются лучше данных по фазам, содержащихся в картотеке JCPDS, так как имеют интенсивности, близкие к наблюдаемым в эксперименте. В картотеке JCPDS, особенно в первых томах, приводятся данные об интенсивностях, полученные съемкой на фотометод с визуальной оценкой интенсивностей, поэтому в карточке присутствуют всего три-пять градаций интенсивности. Расчетные фазы лишены этого недостатка. Кроме того, иногда данные JCPDS относятся к монокристаллам или текстурованным образцам, при этом интенсивности также не совпадают с интенсивностями для порошкового образца. В последних томах JCPDS (тома >30) вместо экспериментального спектра часто приводятся данные, полученные расчетом другими авторами. В имени таких фаз, как правило, указывается дополнительный комментарий " (calculated) ". Все расчетные фазы, полученные по программе SPECTRUM и большинство расчетных фаз JCPDS, имеют данные о корундовом числе. Корундовые числа являются мерой абсолютной интенсивности рефлексов фазы, которая необходима для соотнесения различных фаз между собой при проведении количественного фазового анализа. Однако, из-за отсутствия четкого определения корундового числа, оно может отличаться в несколько раз у разных авторов для одной и той же фазы. Фазы, полученные расчетом по SPECTRUM, имеют соизмеримые корундовые числа.

Карточки содержат информацию о составе, межплоскостных расстояниях и относительных интенсивностях линий. Примерно для половины фаз приводится дополнительная информация, включающая в себя сведения о сингонии или пространственной группе, периодах решетки, числе атомов на элементарную ячейку, а также об условиях существования фазы. В карточке могут содержаться также данные об условиях съемки (метод съемки, излучение, наличие фильтра или монохроматора и др.). Если известны параметры решетки, состав и число атомов в ячейке, для фазы рассчитывается также весовая

Карточка из картотеки JCPDS. Об этом говорит обозначение JCPDS и указание под ним номера тома и карточки.								
Фаза	50000		JCPDS	Синг.	Усл.	Изл.	Съемка	Мнхр.
Co Te Mo O6			32-320	ортр	н.у.	Cu	дфр	?
Элементный состав :	Co,Te,Mo,O							
Атомные пропорции :	1:1:1:6							
Число атомов в ячейке	18					PSC	oP18	
Пространственная группа	P2.12.12		(18)					
Период А (англ.)	5.262							
Период В (англ.)	5.062							
Период С (англ.)	8.857							
Плотность	5.326	г/см ³	Атомная плотность			0.0763	ат/анг ³	
Ка-излучение	Cr	Fe	Co	Ni	Cu	Mo	Ag	
MU (см-1)	2200.2	1439.9	1167.8	950.4	1038.3	125.9	145.7	
Число линий	29							

и атомная плотности, а также линейные коэффициенты поглощения на различных излучениях. Для расчетных фаз в ее названии помимо состава может содержаться указание на структурный тип по Strukturbericht (B1 – для структуры NaCl, C1 – CaF₂, D8_b – для σ-фазы FeCr). Для всех карточек JCPDS указывается номер тома и карточки, для расчетных фаз вместо этого приводится Pearson Symbol Code (PSC), то есть сведения о сингонии (первая буква с – для кубической, h – для гексагональной, t – для тетрагональной, o – для орторомбической, m – для моноклинной и a – для триклинной сингоний), решетке Бравэ (P, F, C или R) и числе узлов в ячейке (число узлов часто равно числу атомов в элементарной ячейке, однако при неполном заполнении правильных систем точек может быть и не равно ему). Так структура NaCl имеет PSC cF8. Так как совершенно такой же PSC cF8 имеет и алмаз, то после PSC указывается еще подтип, cF8/1 – для алмаза и cF8/2 – для типа NaCl (PSC является общепринятым международным обозначением структурных типов, подтип – введен в банке структурных типов, с которым работает входящая в пакет программа расчета теоретических интенсивностей поликристаллических спектров SPECTRUM).

Примерный вид расчетной карточки и карточки из картотеки JCPDS (без линий) показан ниже:

Как упоминалось выше, в файлах банка помимо описанной выше информации хранятся только межплоскостные расстояния и относительные интенсивности. Если известны сингония и периоды решетки, то при просмотре линий выполняется их индентификация с учетом погасаний (если имеется информация о пространственной группе или решетке Бравэ). Приводимые индексы иногда могут отличаться от указанных в карточке JCPDS, особенно

Расчетная карточка. Об этом говорит обозначение PSC и указание под ним структурного типа в обозначении Пирсона oP24.								
Фаза	107000		PSC	Синг.	Усл.	Изл.	Съемка	Мнхр.
Sm2 Al Ge3			oP24/74	ортр	н.у.	Cu	дфр	C
Элементный состав :	Sm,Al,Ge							
Атомные пропорции :	2:1:3							
Число атомов в ячейке	24							
Пространственная группа	Pnma		(62)					
Период А (англ.)	6.815							
Период В (англ.)	4.272							
Период С (англ.)	17.949							
Плотность	6.932	г/см ³	Атомная плотность			0.0459	ат/анг ³	
Ка-излучение	Cr	Fe	Co	Ni	Cu	Mo	Ag	
MU (см-1)	1674.0	1087.4	1881.2	2051.8	1978.7	403.9	211.6	
MU/MU(corr)	4.297	4.474	9.759	13.359	15.636	29.052	29.699	
I _{max} /I _{max} (corr)	1.452	1.395	0.639	0.467	0.399	0.215	0.210	
Абс. инт.	86.966							
Число линий	85							

для линий с малыми межплоскостными расстояниями). При больших периодах и/или низкосимметричной решетке индцирование может занимать несколько минут (в зависимости от быстродействия компьютера и наличия сопроцессора).

Индцирование заключается в определение индексов линий (HKL) по межплоскостным расстояниям d/n , протабулированным в банке. При индцировании перебор рефлексов (HKL) ведется в пределах стандартного стереографического треугольника высшего дифракционного класса каждой сингонии (аналогично тому, как это делается в программе SPECTRUM), т.е., например, в кубической сингонии $L \geq H \geq K \geq 0$, и до значений дифракционного вектора $q=2\pi \cdot \frac{1.02}{d_{\min}}$, где d —минимальное межплоскостное расстояние последней из протабулированных в банке линий фазы, т.е. в случае кубической сингонии при $H + K + L \leq \frac{1.02 \cdot a}{d_{\min}}$, где a — период решетки.

Если известна решетка Браве, перебор рефлексов ведется с учетом погасаний, обусловленных ею. В случае, если известна пространственная группа, учитываются и дополнительные погасания, связанные с наличием плоскостей скользящего отражения и винтовых осей симметрии. Если при вводе фазы пространственная группа преобразовывалась (см. ниже), соответственно, окажутся преобразованными и индексы (HKL).

Отобранные при переборе индексов рефлексы (HKL) упорядочиваются затем по убывающему d/n (что при значительном числе рефлексов и занимает основное время, затрачиваемое на индцирование) и ставятся в соответствие табличным линиям фазы. При этом соответствие устанавливается между табличной линией с межплоскостным расстоянием d и ближайшей к ней теоретической с межплоскостным расстоянием d' . Если $|d - d'| > 0.02 \cdot d$, то линия не индцируется. Если $|d - d'| > 0.005 \cdot d$, то после (HKL) ставится звездочка (плохое совпадение).

Для линий с $d < 1$ анг в случае фаз с большими периодами решетки индцирование не надежно из-за недостаточной точности представления межплоскостных расстояний в банке фаз (0.0005 анг.).

Программа предоставляет возможность просмотра, пополнения и редактирования банка фаз. Для этого предназначена специальная подпрограмма **F2**.

Просмотр фаз, содержащихся в банке может вестись как по номерам, так и по химическому составу. При просмотре по составу возможно применение обобщающих символов, описанных выше (L_n , A_n , Fe^* и т.п.). Просмотр может быть выполнен в краткой форме и в полной форме. В первом случае выводятся лишь название фазы, условия получения и съемки, во втором могут выведены все данные о структуре фазы, а также межплоскостные расстояния, интенсивности, индексы и углы 2ϑ на рабочем излучении.

Операции **пополнения** и **редактирования** банка закрыты паролем.

Программа качественного фазового анализа имеет ряд вспомогательных подпрограмм (все они перечислены в меню программы, вызываемом по нажатию на клавишу **F1**). Список файлов в требуемой директории можно просмотреть в подпрограмме **просмотр списка файлов** (подпрограмма **Alt/F1**). Фазовый анализ можно проводить, используя выборку из банка по химическому составу или другому признаку. Эта выборка может находиться на диске или в другой директории. Для указания пути к ней предназначена подпрограмма **Alt/F2 – изменение пути к основному банку**. Для перезаписи части банка предназначена подпрограмма **Alt/F3 – перезапись части банка фаз**. Подпрограмма **Alt/F4** служит для стирания вспомогательного фаз. Подпрограммы **Alt/F5** и **Alt/F6** предназначены для вывода на экран условных обозначений и названий пространственных групп соответственно. При помощи подпрограммы **Alt/F7** можно записать имитированный спектр, то есть модельный спектр, который строится для фазового анализа размытием экспериментальной штрих-диаграммы интенсивностей при отсутствии истинного (отснятого по точкам) экспериментального спектра. Этот спектр может быть выведен только после того, как он построен, то есть после захода на визуализированный отбор фаз. Имитированный спектр может быть использован в других программах пакета.

Для количественного фазового анализа требуется банк, записанный в своем формате. Для перезаписи части фаз из банка качественного анализа в банк количественного анализа, а также для коррекции банка количественного анализа используется подпрограмма **Ctrl/F1**.