

Ulf Nilsson

Från: Ulf Nilsson
Skickat: den 19 januari 2020 09:41
Till: Jens Birch
Ämne: SV: XRD-mätningar

Kategorier: DIARIEFÖRD

Hej igen Jens,

Här är namnen på de som troligtvis genomförde mätningarna:

For Azam Khan article: It is most probably Mazhar Ali as Mushtaque said it was not him.

For Mushtaque article: Most probably it is Mushtaque himself, but I wait for his reply.

For Elfatih article: it was Elfatih himself.

--ulf

Från: Ulf Nilsson
Skickat: den 18 december 2019 16:37
Till: Jens Birch <jens.birch@liu.se>
Ämne: Sv: XRD-mätningar

Hej Jens,

Stort tack! Jag ska se om jag kan få namn på den/de som gjort mätningarna. Återkommer.

--ulf

Från: Jens Birch <jens.birch@liu.se>
Skickat: den 18 december 2019 15:17
Till: Ulf Nilsson <ulf.nilsson@liu.se>
Ämne: Re: XRD-mätningar

Hej Ulf.

Jag har tittat på artiklarna och de datafiler som du skickade samt läst kritiken på PubPeer.

Jag gjorde backup på instrumentet som använts samma kväll som vi pratade om detta och har letat efter de datafiler som ligger till grund för artiklarnas figurer men utan resultat. Det ligger drygt 42000 datafiler på disken som alla har ganska kryptiska namn så det är liten sannolikhet att jag ska hitta exakt de rätta filerna.

Det skulle underlätta om jag visste vem som gjort mätningarna. Kanske kan du fråga Omer Nur om det?

I avsaknad av rådata, lämnar jag ändå mina bedömningar av de data som diskuteras i artiklarna i de fyra PubPeer-trådarna.

Artikel 1:

"Polyethylene glycol-doped BiZn₂VO₆..." av Mahsa Pirhashemi et al. RSC Adv. **8**, (2018) 37480–37491 så hade du ju skickat med datafiler som ska ha legat till grund för figur 2 i artikeln samt ett excelark där Galia(?) visar hur data kopierats och transformerats.

Förutom att det är absolut klart att det är identiska rådata som ligger bakom de 5 översta diffraktogrammen i figur 2 så kan jag säga är att samtliga datafiler med RD-filtillägg utom en ("ZnO.RD") som du bifogade helt klart har blivit manipulerade. Det kan jag se genom att antalet räknade röntgenkvanta i varje datapunkt inte är registrerade som heltal. Antalet röntgenkvanta är naturligtvis alltid heltalsvärden (tänk ett knaster från en Geigermätare).

Det är anmärkningsvärt i sig att de RD-filerna inte är originalfiler eftersom RD-filer är binärfiler som normalt endast skapas av mätdatorn och kan bara visualiseras i specialprogramvara för Philips XRD-utrustningar. Mao anses de vara rådata och kan inte användas för att plotta snygga publikationsmässiga grafer - till det behövs en konvertering till ASCII-kod.

Det finns mjukvara som kan skapa binära RD-filer utifrån en ASCII-fil men den enda vettiga anledning till att göra det är om man råkat kasta bort RD-filen efter man skapat ASCII-filen men sedan vill återskapa binärfilen.

En annan anledning kan ju vara att man konverterat rådata från binärt till ASCII varefter dessa enkelt kan manipuleras för att sedan konverteras tillbaka till binära rådata för att få det att *se ut* som rådata.

Artikel 2:

"A novel investigation on carbon nanotube/ZnO, Ag/ZnO and Ag/carbon nanotube/ZnO nanowires junctions for harvesting piezoelectric potential on textile", Azam Khan, et al. Journal of Applied Physics **116**, (2014) 034505

Där gäller diskussionen om Figur 4 och likheten i röntgendiffraktogrammen för ZnO/CNT on CT (röd) och ZnO/CNT on UCT (blå) i vinkelområdet 10-29°.

Jag finner det mycket osannolikt att den delen av diffraktogrammen skulle komma från olika ursprungsdata. Bruset är stokastiskt till sin natur (Poisson-fördelat) och är *aldrig* det samma i två mätningar - även om man gjorde dem på samma prov just efter varandra. Detta var väl samma slutsats som du kom fram till. Med andra ord måste författarna ha klippt ihop *minst* två datafiler för att få till ett av de diffraktogrammen.

Anledningen kan man spekulera om. Tex att man av något skäl inte mätt hela vinkelområdet på ett av proven men vill (eller uppmanats av reviewern) visa att det inte finns/saknas några oförutsedda toppar där.

Artikel 3:

"Efficient Ni-Fe layered double hydroxides/ZnO nanostructures for photochemical water splitting" Elfatih Mustafa, et al. Journal of Solid State Chemistry **273** (2019) 186- 191

Här handlar det om att de två nedersta graferna i Figur 3 påstås vara samma data.

Min bedömning är att det är identiska mätningar som ligger till grund för de två difraktogrammen. Detta grundar sig återigen på att bruset i XRD alltid följer Poisson-statistik och därmed är stokastiskt. De två understa graferna i Figur 3 har identiskt brus. Skillnaden som syns mellan graferna beror helt och hållet på att de är plottade med lite olika linjetjocklek.

Artikel 4:

"Effect of anions on the morphology of Co₃O₄ nanostructures grown by hydrothermal method and their pH sensing application", Mushtaque Hussain et al. Journal of Electroanalytical Chemistry **717-718** (2014) 78–82

Återigen frågan om identiska data ligger till grund för diffraktogram, här samtliga grafer i Figur 2.

Min bedömning är att det är identiska mätningar som ligger till grund för de fyra difraktogrammen. eventuella visuella avvikelser beror på plottningens/printerns/scannerns upplösning.

Så mina slutsatser stämmer i stort sett med de anklagelser som riktas i PubPeer.

Hälsningar, Jens

On 2019-11-22 15:49, Ulf Nilsson wrote:

Hej Jens,

Här är länk till PubPeer:

<https://pubpeer.com/search?q=omer+nur>

Jag bifogar även de (just nu) fyra aktuella artiklarna, samt de mätdata jag fick från Galia som rör Fig 2 i RSC Advances. Även Fig 13b i samma artikel är skum men där vet jag inte om jag fått originaldata.

Ha en skön helg,
--ulf

--

Jens Birch, PhD, Professor
Head of Division

Thin Film Physics division
Dept of Physics, Chemistry and Biology

Mobile: +46705227686
Linköping University
S-581 83 Linköping, Sweden