

19 oktober 2020

Nämnden för prövning av oredlighet i forskning
Box 2110
750 02 Uppsala

Analys av rådata i ärende 20/0025

Undertecknad har på uppdrag av Npof (Dnr. 3.1-20/0025) granskat eventuell oredlighet i fyra vetenskapliga artiklar författade av forskare vid Linköpings universitet. Ärendet rör misstänkt fabricering av röntgendiffraktogram i sammanlagt fem figurer i dessa fyra artiklar, publicerade mellan 2014 och 2019. Sakkunnigutlåtande i ärende 20/0025 skickades till Npof den 28 augusti 2020. Efter Yttrande (2/5) ärende Dnr. 3.1-20/0025 har Npof bett mig att analysera rådata i de två aktuella figurerna i artikel [1]:

Figur 2 och Figur 13b i artikel [1]

Mahsa Pirhashemi, Sami Elhag, Aziz Habibi-Yangjeh, Galia Pozina, Magnus Willander and Omer Nur.

Polyethylene glycol-doped BiZn₂VO₆ as a high-efficiency solar-light-activated photocatalyst with substantial durability toward photodegradation of organic contaminations.

RSC Advances, 8 (2018) 37480-37491.

doi: 10.1039/c8ra06896h

Metod

I doi-länken till artikel [1] på RCS hemsida finns originalartikeln publicerad, dock utan länk till ytterligare data såsom rådata.

Rådata för Figur 2 och Figur 13b i artikel [1] har laddats ner från mappen Raw data.zip (193.78 KB), bilaga till filen Yttrande 2 av 5.pdf (296.62 KB) som skickats från omer.nour@liu.se till registrator@oredlighetsprovning.se September 13, 2020 10:54:20 AM.

Figur 1-1 visar de komprimerade filerna i mappen Raw data.zip före extrahering till full storlek. Vid extraheringen ändras modifieringsdatumet för filerna.

Name	Type	Compressed size	Password ...	Size	Ratio	Date modified
0.01	Microsoft Excel Comma Separated Values File	8 KB	No	30 KB	75%	2018-03-16 11:32
0.01	RAW File	2 KB	No	24 KB	93%	2018-03-16 11:32
0.01.ASC	ASC File	9 KB	No	54 KB	85%	2018-03-16 11:32
0.01.RD	RD File	3 KB	No	7 KB	64%	2018-03-16 11:32
0.1	Microsoft Excel Comma Separated Values File	9 KB	No	33 KB	75%	2018-03-16 12:18
0.1	RAW File	3 KB	No	24 KB	92%	2018-03-16 12:18
0.1.ASC	ASC File	9 KB	No	56 KB	85%	2018-03-16 12:18
0.1.RD	RD File	3 KB	No	7 KB	62%	2018-03-16 12:18
0.05	Microsoft Excel Comma Separated Values File	9 KB	No	36 KB	77%	2018-03-16 12:54
0.05	RAW File	2 KB	No	24 KB	93%	2018-03-16 12:54
0.05.ASC	ASC File	9 KB	No	66 KB	87%	2018-03-16 12:54
0.05.RD	RD File	3 KB	No	7 KB	64%	2018-03-16 12:54
0.15	Microsoft Excel Comma Separated Values File	9 KB	No	36 KB	77%	2018-03-16 13:37
0.15	RAW File	3 KB	No	24 KB	91%	2018-03-16 13:37
0.15.ASC	ASC File	9 KB	No	65 KB	87%	2018-03-16 13:37
0.15.RD	RD File	3 KB	No	7 KB	62%	2018-03-16 13:37
BiVO4	Microsoft Excel Comma Separated Values File	8 KB	No	30 KB	74%	2018-03-16 14:11
BiVO4	RAW File	3 KB	No	24 KB	92%	2018-03-16 14:11
BiVO4.ASC	ASC File	9 KB	No	65 KB	87%	2018-03-16 14:11
BiVO4.RD	RD File	3 KB	No	7 KB	63%	2018-03-16 14:11
ZnO	Microsoft Excel Comma Separated Values File	8 KB	No	30 KB	74%	2018-03-16 14:32
ZnO	RAW File	3 KB	No	25 KB	91%	2018-03-16 14:32
ZnO.ASC	ASC File	9 KB	No	42 KB	80%	2018-03-16 14:32
ZnO.RD	RD File	2 KB	No	7 KB	72%	2018-03-16 14:32
BiZn2VO6	Microsoft Excel Comma Separated Values File	9 KB	No	35 KB	77%	2018-04-26 00:15
BiZn2VO6	RAW File	3 KB	No	25 KB	92%	2018-04-26 00:15
BiZn2VO6.ASC	ASC File	9 KB	No	59 KB	85%	2018-04-26 00:15
BiZn2VO6.RD	RD File	2 KB	No	7 KB	74%	2018-04-26 00:15
PEGZnO	Microsoft Excel Comma Separated Values File	9 KB	No	34 KB	76%	2018-09-14 11:45
PEGZnO	RAW File	2 KB	No	25 KB	92%	2018-09-14 11:45
PEGZnO.ASC	ASC File	9 KB	No	64 KB	86%	2018-09-14 11:45
PEGZnO.RD	RD File	2 KB	No	7 KB	72%	2018-09-14 11:45
Recycling	Microsoft Excel Comma Separated Values File	9 KB	No	34 KB	76%	2018-09-15 00:20
Recycling	RAW File	3 KB	No	25 KB	91%	2018-09-15 00:20
Recycling.ASC	ASC File	10 KB	No	81 KB	89%	2018-09-15 00:20
Recycling.RD	RD File	2 KB	No	7 KB	74%	2018-09-15 00:20

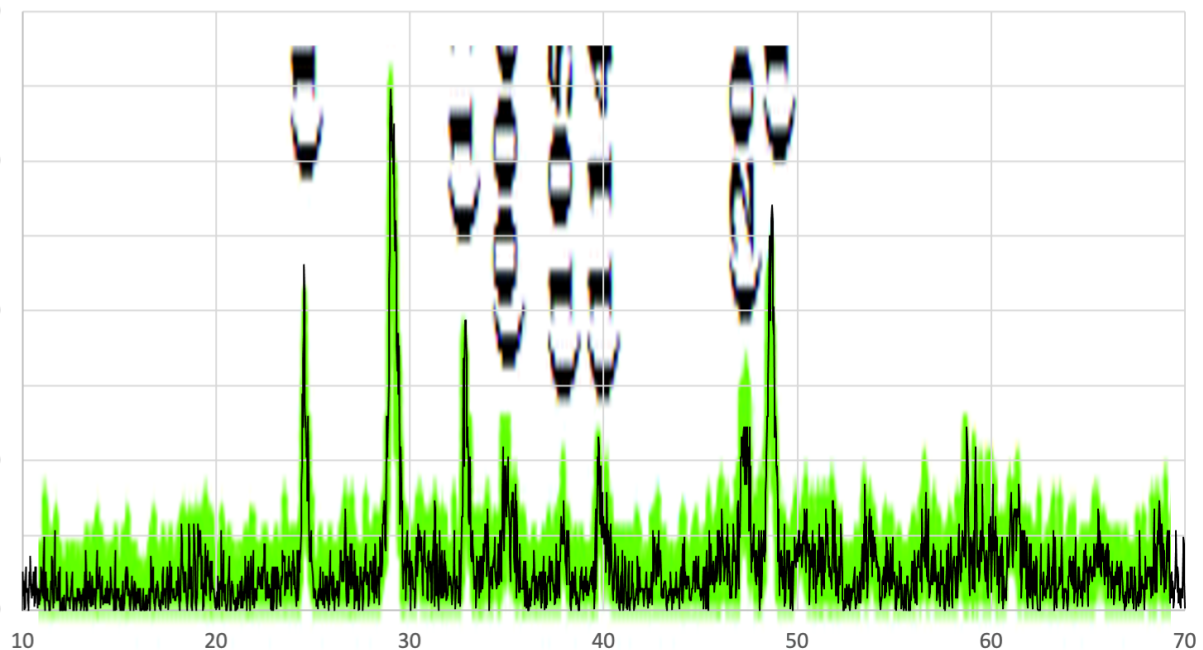
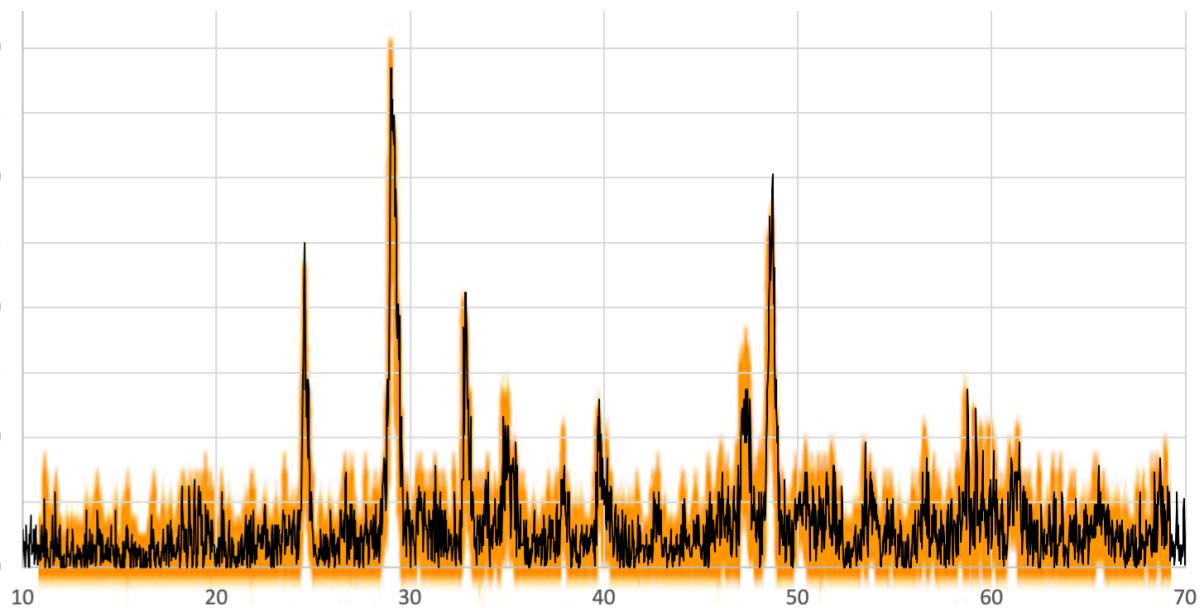
Figur 1-1. Filer i mappen Raw data.zip före extrahering till originalstorlek.

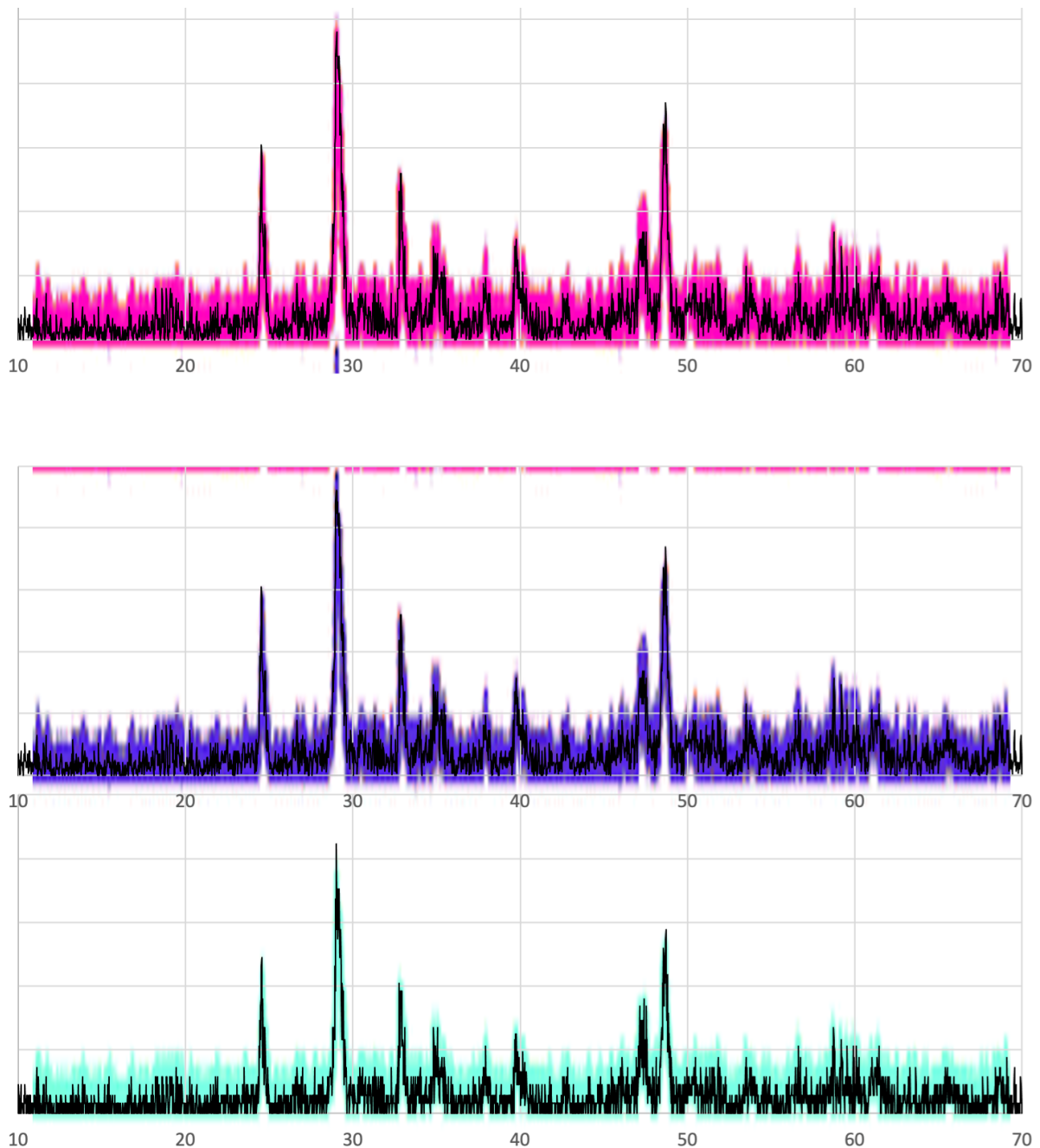
För bedömning av rådata för de plottade röntgendiffraktogrammen i Figur 2 i Artikel [1] har datan i följande filer i Figur 1-1 analyserats: 0.01.csv, 0.01.RD, 0.05.csv, 0.05.RD, 0.1.csv, 0.1.RD, 0.15.csv, 0.15.RD, BiZn2VO6.csv och BiZn2VO6.RD. För bedömning av rådata för de plottade röntgendiffraktogrammen i Figur 13b i Artikel [1] har datan i följande filer analyserats: 0.1.csv, 0.1.RD, Recycling.csv och Recycling.RD. Den använda röntgendiffraktometern är enligt Artikel [1] en Philips PW 1729 med rådata i filformatet Philips Raw Data, RD.

Bedömning av rådata för röntgendiffraktogrammen i Figur 2 i artikel [1]

För bedömning av rådata för diffraktogrammen i Figur 2 har datan i följande RD-filer i mappen Raw data.zip (Figur 1-1) först analyserats: BiZn₂VO₆.RD, 0.01.RD, 0.05.RD, 0.1.RD och 0.15.RD.

Figur 2-1 visar en förstoring av Figur 2 i artikel [1] med röntgendiffraktogram för BiZn₂VO₆ (ljusblått), 0,01% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (lila), 0,05% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (rosa), 0,10% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (ljusgrönt) och 0,15% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (orange). Ovanpå de fem röntgendiffraktogrammen ligger diffraktogram (svarta) som är plottade med rådatan i filerna BiZn₂VO₆.RD (på ljusblått), 0.01.RD (på lila), 0.05.RD (på rosa), 0.1.RD (på ljusgrönt) och 0.15.RD (på orange).





Figur 2-1. Analys av Figur 2 i artikel [1] med diffraktogram från rådatan i filerna BiZn₂VO₆.RD, 0.01.RD, 0.05.RD, 0.1.RD, och 0.15.RD, inlagda i svart på de fem översta röntgen-diffraktogrammen i figuren. Diffraktogrammet från datan i BiZn₂VO₆.RD ligger ovanpå BiZn₂VO₆ (ljusblått), diffraktogrammet från 0.01.RD ligger ovanpå 0,01% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (lila), från 0.05.RD ligger ovanpå 0,05% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (rosa), från 0.1.RD ovanpå 0,10% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (ljusgrönt) och 0.15.RD ligger ovanpå 0,15 % PEG-dopad BiZn₂VO₆ (orange).

För diffraktogrammen för BiZn₂VO₆ (ljusblått röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från rådatan i BiZn₂VO₆.RD) i Figur 2-1 är överensstämmelsen mycket god (med avseende på intensitet och 2theta-position av diffraktionstoppar och brus). Datat i filen BiZn₂VO₆.RD är enligt min bedömning den rådata som använts för att plotta det ljusblåa röntgendiffraktogrammet för BiZn₂VO₆ i Figur 2 i artikel [1].

För diffraktogrammen för 0,01% PEG-dopad BiZn_2VO_6 (lila röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från rådatan i 0.01.RD) i Figur 2-1 är överensstämmelsen betydligt sämre (med avseende på intensitet och 2θ -position av diffraktionstoppar och brus). Dålig överensstämmelse syns tydligt t.ex. i områdena $2\theta = 14 - 17^\circ$, $26 - 28^\circ$ och $44 - 47^\circ$. Datan i filen 0.01.RD är enligt min bedömning inte den rådata som använts för att plotta det lila röntgendiffraktogrammet för 0,01% PEG-dopad BiZn_2VO_6 i Figur 2 i artikel [1].

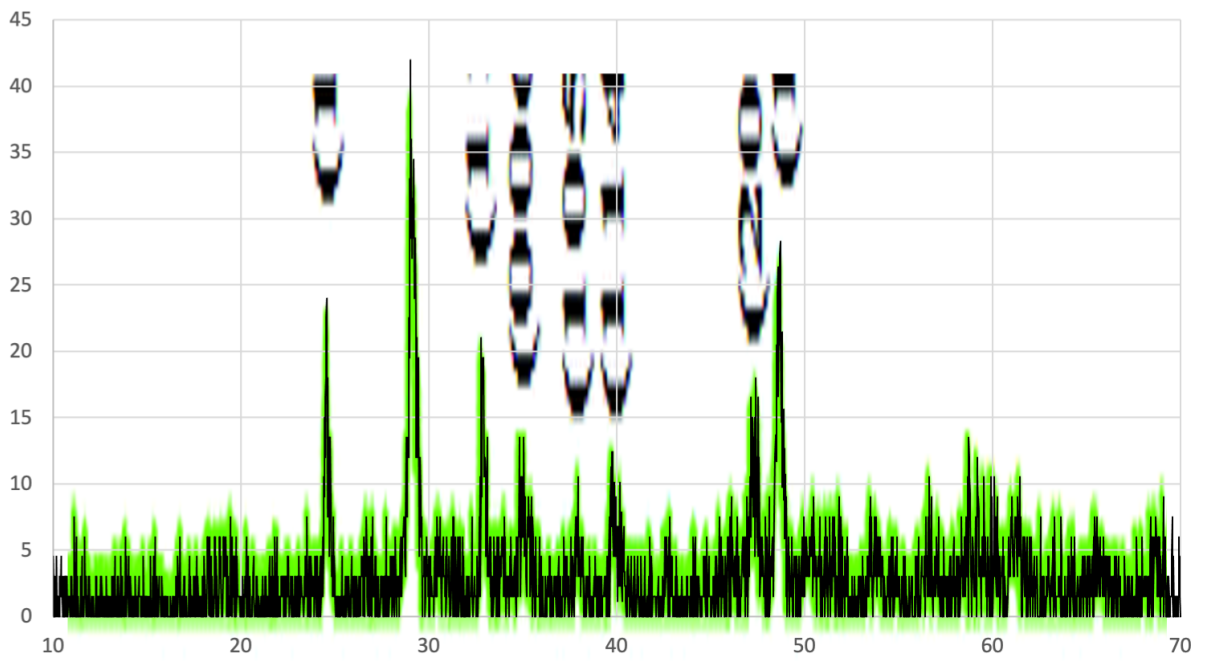
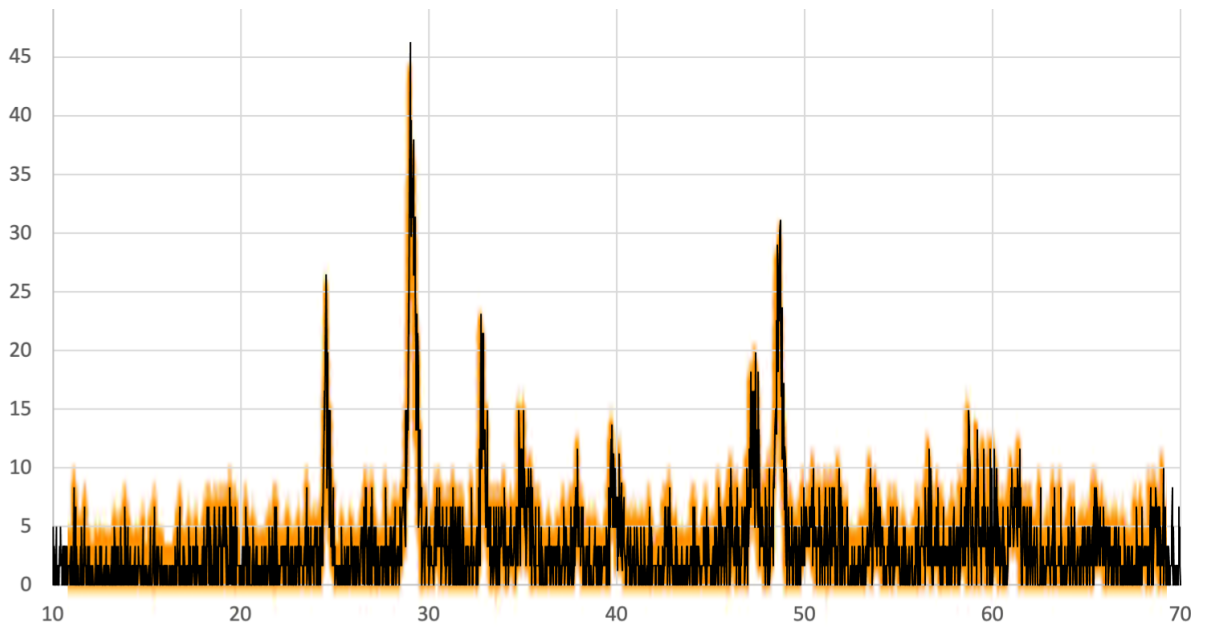
Även för diffraktogrammen för 0,05% PEG-dopad BiZn_2VO_6 (rosa röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från rådatan i 0.05.RD) i Figur 2-1 är överensstämmelsen betydligt sämre (med avseende på intensitet och 2θ -position av diffraktionstoppar och brus). Dålig överensstämmelse syns tydligt t.ex. i områdena $2\theta = 14 - 17^\circ$, $26 - 28^\circ$ och $44 - 47^\circ$. Datan i filen 0.05.RD är enligt min bedömning inte den rådata som använts för att plotta det rosa röntgendiffraktogrammet för 0,05% PEG-dopad BiZn_2VO_6 i Figur 2 i artikel [1].

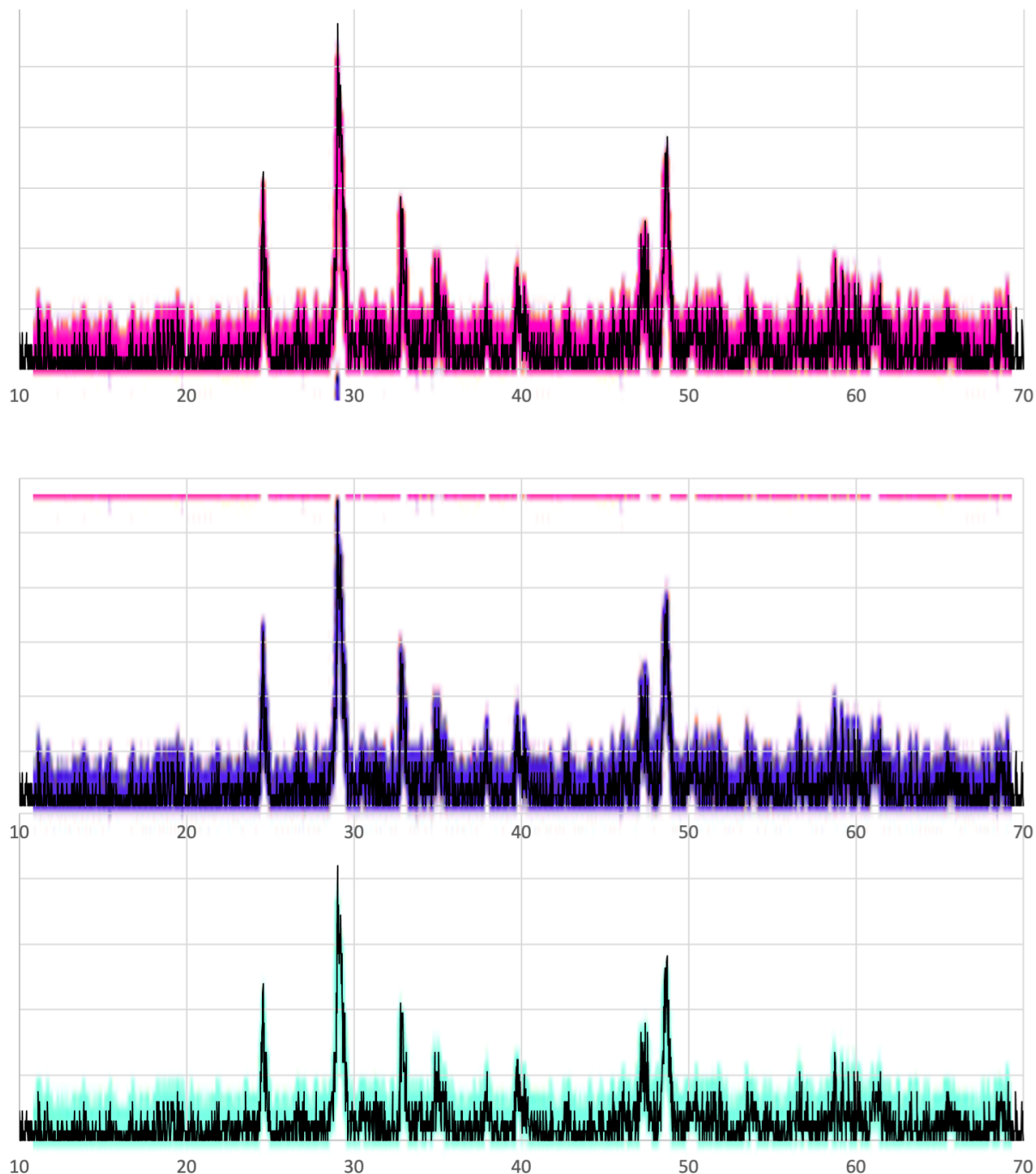
Även för diffraktogrammen för 0,10% PEG-dopad BiZn_2VO_6 (ljusgrönt röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från rådatan i 0.1.RD) i Figur 2-1 är överensstämmelsen betydligt sämre (med avseende på intensitet och 2θ -position av diffraktionstoppar och brus). Dålig överensstämmelse syns tydligt t.ex. i områdena $2\theta = 14 - 17^\circ$, $26 - 28^\circ$ och $44 - 47^\circ$. Datan i filen 0.1.RD är enligt min bedömning inte den rådata som använts för att plotta det ljusgröna röntgendiffraktogrammet för 0,10% PEG-dopad BiZn_2VO_6 i Figur 2 i artikel [1].

Även för diffraktogrammen för 0,15% PEG-dopad BiZn_2VO_6 (gult röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från rådatan i 0.15.RD) i Figur 2-1 är överensstämmelsen betydligt sämre (med avseende på intensitet och 2θ -position av diffraktionstoppar och brus). Dålig överensstämmelse syns tydligt t.ex. i områdena $2\theta = 14 - 17^\circ$, $26 - 28^\circ$ och $44 - 47^\circ$. Datan i filen 0.15.RD är enligt min bedömning inte den rådata som använts för att plotta det gula röntgendiffraktogrammet för 0,15% PEG-dopad BiZn_2VO_6 i Figur 2 i artikel [1].

På motsvarande sätt har även datan i följande csv-filer i mappen Raw data.zip (Figur 1-1) analyserats: BiZn_2VO_6 .csv, 0.01.csv, 0.05.csv, 0.1.csv och 0.15.csv.

Figur 2-2 visar en förstoring av Figur 2 i artikel [1] med röntgendiffraktogram av BiZn_2VO_6 (ljusblått), 0,01% PEG-dopad BiZn_2VO_6 (lila), 0,05% PEG-dopad BiZn_2VO_6 (rosa), 0,10% PEG-dopad BiZn_2VO_6 (ljusgrönt) och 0,15 % PEG-dopad BiZn_2VO_6 (orange). Ovanpå de fem röntgendiffraktogrammen ligger diffraktogram (svarta) som är plottade med datan i filerna BiZn_2VO_6 .csv (på ljusblått), 0.01.csv (på lila), 0.05.csv (på rosa), 0.1.csv (på ljusgrönt) och 0.15.csv (på orange).





Figur 2-2. Analys av Figur 2 i artikel [1] med diffraktogram från datan i filerna BiZn2VO6.csv, 0.01.csv, 0.05.csv, 0.1.csv och 0.15.csv inlagda i svart på de fem översta röntgen-diffraktogrammen i figuren. Diffraktogrammet från datan i BiZn2VO6.csv ligger ovanpå BiZn₂VO₆ (ljusblått), diffraktogrammet från 0.01.csv ligger ovanpå 0,01% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (lila), från 0.05.csv ligger ovanpå 0,05% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (rosa), från 0.1.csv ovanpå 0,10% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (ljusgrönt) och 0.15.csv ligger ovanpå 0,15 % PEG-dopad BiZn₂VO₆ (orange).

För diffraktogrammen för BiZn₂VO₆ (ljusblått röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från datan i BiZn2VO6.csv) i Figur 2-2 är överensstämmelsen mycket god (med avseende på intensitet och 2theta-position av diffraktionstoppar och brus). Datat i filen BiZn2VO6.csv är enligt min bedömning den data som använts för att plotta det ljusblåa röntgendiffraktogrammet för BiZn₂VO₆ i Figur 2 i artikel [1]. Eftersom även

överensstämmelsen med datan i filen BiZn₂VO₆.RD är mycket god jämfördes datan i filerna BiZn₂VO₆.RD och BiZn₂VO₆.csv. Efter division med skalningsfaktorn 1,0076 är datan i BiZn₂VO₆.RD identisk med datan i BiZn₂VO₆.csv.

Även för diffraktogrammen för 0,01% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (lila röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från datan i 0.01.csv) i Figur 2-2 är överensstämmelsen mycket god (med avseende på intensitet och 2theta-position av diffraktionstoppar och brus). Datat i filen 0.01.csv är enligt min bedömning den data som använts för att plotta det lila röntgendiffraktogrammet för 0,01% PEG-dopad BiZn₂VO₆ i Figur 2 i artikel [1].

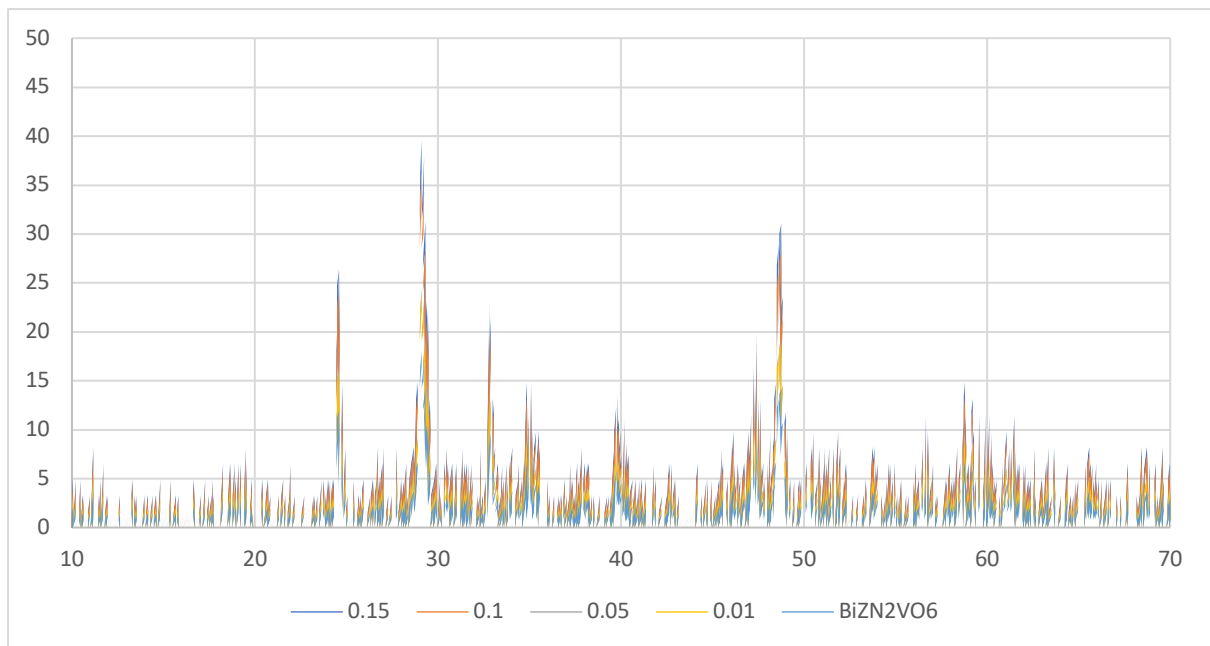
Även för diffraktogrammen för 0,05% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (rosa röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från datan i 0.05.csv) i Figur 2-2 är överensstämmelsen mycket god (med avseende på intensitet och 2theta-position av diffraktionstoppar och brus). Datat i filen 0.05.csv är enligt min bedömning den data som använts för att plotta det rosa röntgendiffraktogrammet för 0,05% PEG-dopad BiZn₂VO₆ i Figur 2 i artikel [1].

Även för diffraktogrammen för 0,10% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (ljusgrönt röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från datan i 0.1.csv) i Figur 2-2 är överensstämmelsen mycket god (med avseende på intensitet och 2theta-position av diffraktionstoppar och brus). Datat i filen 0.1.csv är enligt min bedömning den data som använts för att plotta det ljusgröna röntgendiffraktogrammet för 0,10% PEG-dopad BiZn₂VO₆ i Figur 2 i artikel [1].

Även för diffraktogrammen för 0,15% PEG-dopad BiZn₂VO₆ (gult röntgendiffraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från datan i 0.15.csv) i Figur 2-2 är överensstämmelsen mycket god (med avseende på intensitet och 2theta-position av diffraktionstoppar och brus). Datat i filen 0.15.csv är enligt min bedömning den data som använts för att plotta det gula röntgendiffraktogrammet för 0,15% PEG-dopad BiZn₂VO₆ i Figur 2 i artikel [1].

Eftersom datan i de fem csv-filerna BiZn₂VO₆.csv, 0.01.csv, 0.05.csv, 0.1.csv och 0.15.csv enligt min bedömning (se ovan) är den data som använts för att plotta de fem översta röntgendiffraktogrammen i Figur 2 i artikel [1] har dessa csv-filer analyserats ytterligare. Diffraktogram från datan i csv-filerna har plottats i samma figurer, dels obearbetade och dels dividerade med respektive skalningsfaktor. Skalningsfaktorerna har tagits fram genom att dividera intensiteten för diffraktionstoppen med högst intensitet (vid 2theta = 29,01°) i filerna BiZn₂VO₆.csv, 0.01.csv, 0.05.csv, 0.1.csv och 0.15.csv med intensiteten för diffraktionstoppen vid 2theta = 29,01° i filen BiZn₂VO₆.csv.

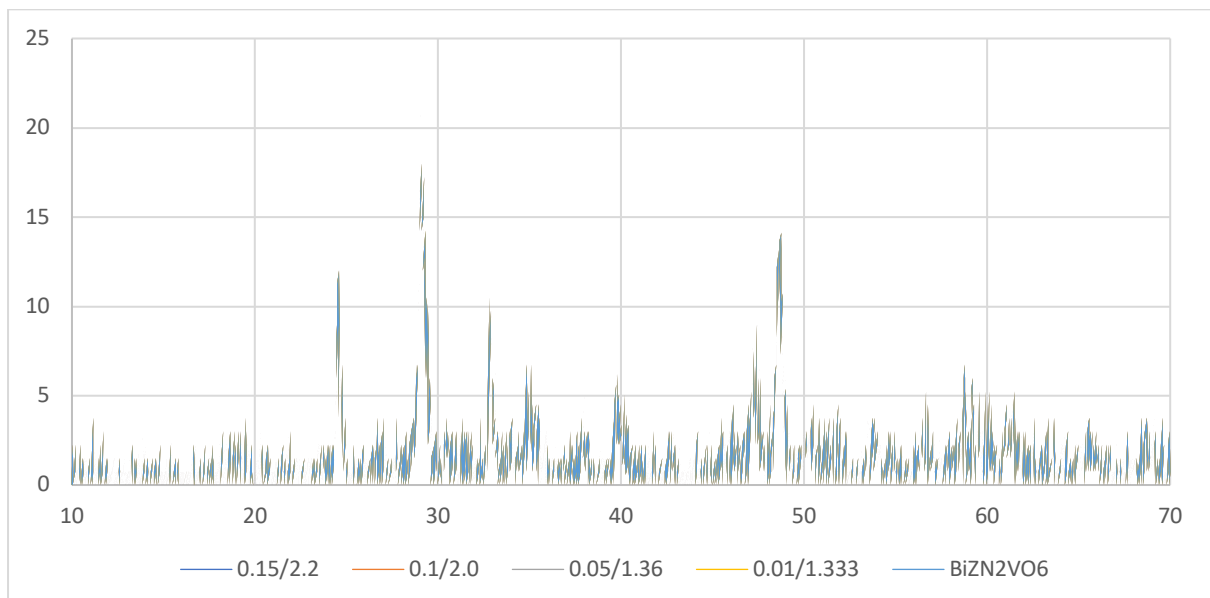
Figur 2-3 visar diffraktogrammen från datan i de fem csv-filerna plottade i samma figur.



Figur 2-3. Diffraktogram plottade från datan i filerna BiZn₂VO₆.csv, 0.01.csv, 0.05.csv, 0.1.csv och 0.15.csv.

Diffraktogrammen i Figur 2-3 är förutom tydliga skillnader mellan diffraktionstopparnas absoluta intensitet mycket lika varandra med diffraktionstoppar vid samma 2theta-positioner.

Om man jämför intensiteten för diffraktionstopparna vid varje 2theta-position i de fem olika csv-filerna med motsvarande intensiteter för BiZn₂VO₆ som referens (1,000) är skalningsfaktorn 1,333 för 0.01.csv, 1,360 för 0.05.csv, 2,000 för 0.1.csv och 2,200 för 0.15.csv. Figur 2-4 visar diffraktogram från datan i de fem csv-filerna dividerade med respektive skalningsfaktor.

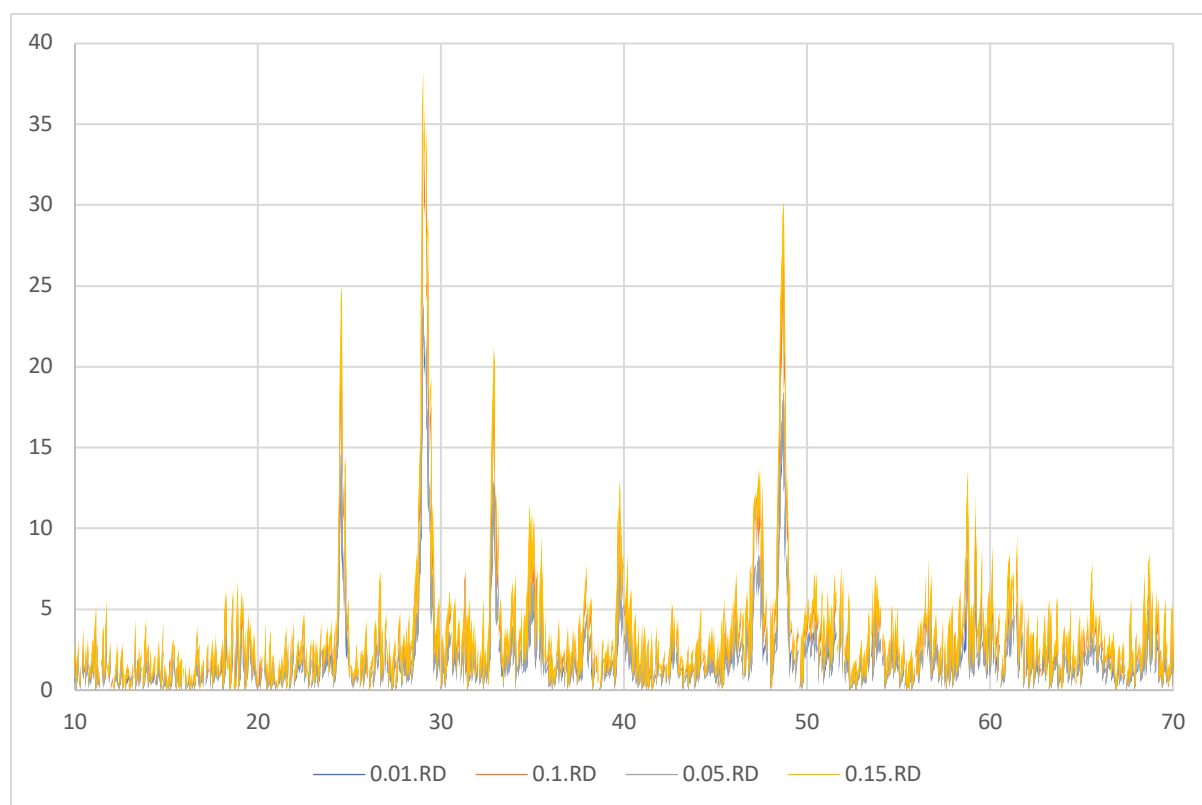


Figur 2-4. Diffraktogram plottade från datan i filerna BiZn₂VO₆.csv, 0.01.csv, 0.05.csv, 0.1.csv och 0.15.csv. Diffraktogrammen är dividerade med respektive skalningsfaktor; 1,333 för 0.01.csv, 1,360 för 0.05.csv, 2,000 för 0.1.csv och 2,200 för 0.15.csv (1,000 för BiZn₂VO₆.csv).

De fem diffraktogrammen i Figur 2-4 är efter division med respektive skalningsfaktor identiska med diffraktionstoppar och brus vid exakt samma 2θ -positioner och med exakt samma intensitet. Eftersom diffraktogrammen är identiska betyder det att samma diffraktionsdata som i filen BiZn₂VO₆.csv men multiplicerad med respektive skalningsfaktor (1,333, 1,360, 2,000, och 2,200) har använts för att få fram diffraktionsdatan i filerna: 0.01.csv, 0.05.csv, 0.10.csv, och 0.15.csv.

På motsvarande sätt har även rådatan i de fyra RD-filerna i mappen Raw data.zip (Figur 1-1), som enligt min bedömning (se ovan) inte har använts för att plotta de översta fyra röntgendiffraktogrammen i Figur 2 i artikel [1], analyserats ytterligare. Diffraktogram från rådatan i RD-filerna har plottats i samma figurer, dels obearbetade och dels dividerade med respektive skalningsfaktor. Skalningsfaktorerna har tagits fram genom att dividera intensiteten för diffraktionstoppen med högst intensitet (vid $2\theta = 29,01^\circ$) i filerna 0.05.RD, 0.1.RD och 0.15.RD med intensiteten för diffraktionstoppen vid $2\theta = 29,01^\circ$ i filen 0.01.RD.

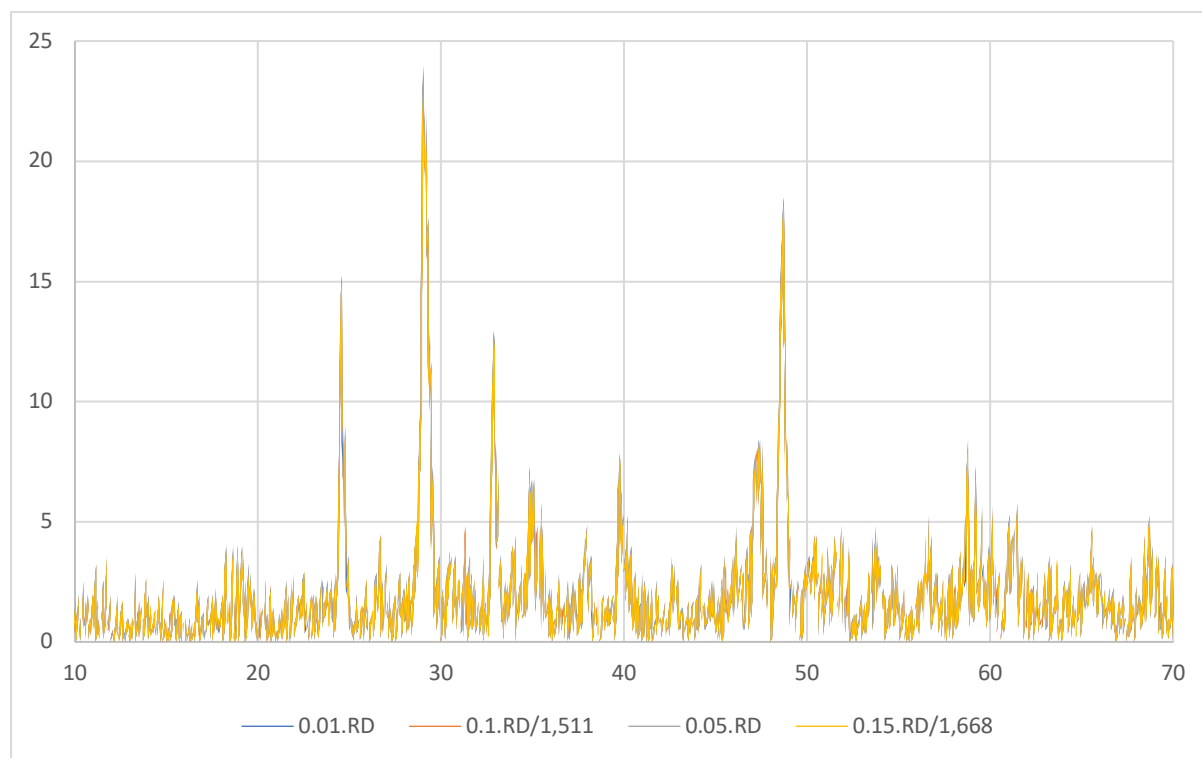
Figur 2-5 visar diffraktogrammen från rådatan i de fyra RD-filerna 0.01.RD, 0.05.RD, 0.1.RD och 0.15.RD plottade i samma figur.



Figur 2-5. Diffraktogram plottade från rådatan i RD-filerna 0.01.RD, 0.05.RD, 0.1.RD och 0.15.RD.

De fyra diffraktogrammen i Figur 2-5 är förutom tydliga skillnader mellan diffraktionstopparnas absoluta intensitet lika varandra med diffraktionstoppar vid samma 2θ -positioner.

Om man jämför intensiteten för diffraktionstopparna vid varje 2theta-position i de fyra olika RD-filerna med motsvarande intensiteter för 0.01 som referens (1,000) är skalningsfaktorn 1,000 för 0.05.RD, 1,511 för 0.1.RD och 1,668 för 0.15.RD (1,000 för 0.01.RD). Figur 2-6 visar diffraktogram plottade med rådatan i de fyra RD-filerna dividerade med respektive skalningsfaktor.



Figur 2-6. Diffraktogram plottade från datan i filerna 0.01.RD, 0.05.RD, 0.1.RD och 0.15.RD. Diffraktogrammen är dividerade med respektive skalningsfaktor; 1,000 för 0.05.RD, 1,511 för 0.1.RD och 1,668 för 0.15.RD (1,000 för 0.01.RD).

De fyra diffraktogrammen i Figur 2-6 är efter division med respektive skalningsfaktor mycket lika varandra med diffraktionstoppar och brus vid samma 2theta-positioner och med mycket lik intensitet. Diffraktogrammen är dock *inte* identiska. Eftersom rådatan i RD-filerna 0.01.RD, 0.05.RD, 0.1.RD och 0.15.RD efter multiplikation med respektive skalningsfaktor är mycket lika men inte identiska kan man inte helt säkert konstatera att de kommer från samma rådata. Men som konstaterats ovan har rådatan i dessa fyra RD-filer (0.01.RD, 0.05.RD, 0.1.RD och 0.15.RD) inte använts för att plotta de fyra översta röntgendiffraktogrammen i Figur 2 i artikel [1].

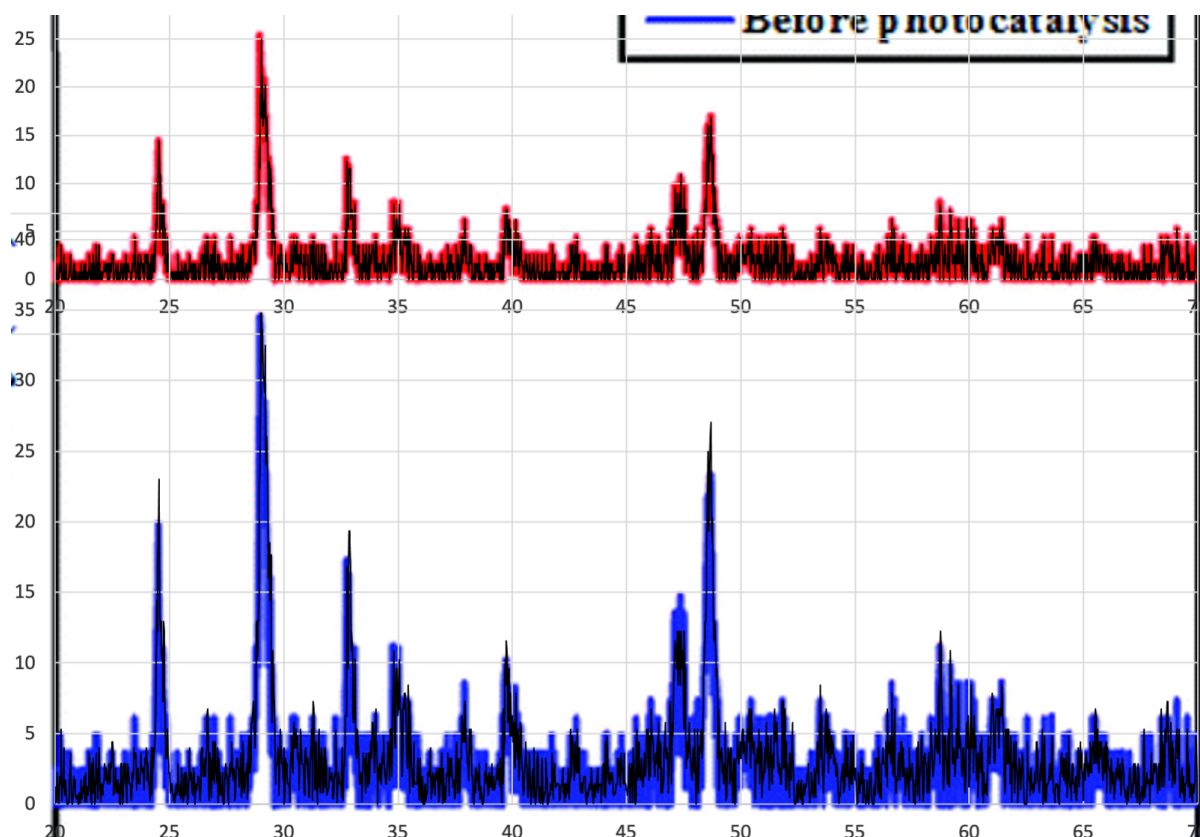
Slutsats: Eftersom röntgendiffraktogrammen för de fem olika BiZn_2VO_6 -proverna i Figur 2 i artikel [1] är *identiska* (med avseende på position och relativ intensitet mellan diffraktionstopparna för varje prov, absolut intensitet för en och samma topp för de olika proverna dividerade med en skalningsfaktor, men framför allt, med avseende på brus) kan de inte komma från fem olika röntgendiffraktionsmätningar. Efter noggrann jämförelse med rådatan i filerna BiZn_2VO_6 .RD, 0.01.RD, 0.05.RD, 0.1.RD och 0.15.RD är min slutsats att rådatan i BiZn_2VO_6 .RD har använts för ett plotta ett av röntgendiffraktogrammen (BiZn_2VO_6), i Figur 2 i artikel [1]. Rådatan i filerna 0.01.RD, 0.05.RD, 0.1.RD och 0.15.RD har däremot inte

använts för att plotta röntgendiffraktogram i Figur 2. Efter noggrann jämförelse med datan i filerna BiZn2VO6.csv, 0.01.csv, 0.05.csv, 0.1.csv och 0.15.csv kan jag konstatera att de fem röntgendiffraktogrammen (BiZn₂VO₆, 0,01% PEG-dopad BiZn₂VO₆, 0,05% PEG-dopad BiZn₂VO₆, 0,10% PEG-dopad BiZn₂VO₆ och 0,15% PEG-dopad BiZn₂VO₆) i Figur 2 i artikel [1] är plottade med datan i dessa fem csv-filer. Samma diffraktionsdata som i filen BiZn2VO6.csv men multiplicerad med respektive skalningsfaktor (1,333, 1,360, 2,000, och 2,200) har använts för att få fram diffraktionsdatan i filerna: 0.01.csv, 0.05.csv, 0.10.csv, och 0.15.csv. Datan i dessa fyra filer är fabricerad. Minst fyra av de fem översta röntgendiffraktogrammen i Figur 2 i artikel [1] är därför fabricerade.

Bedömning av rådata för röntgendifraktogram i Figur 13b i artikel [1]

För bedömning av rådata för diffraktogrammen i Figur 13b i artikel [1] har först datan i följande RD-filer i mappen Raw data.zip (Figur 1-1) analyserats: 0.1.RD och Recycling.RD.

Figur 3-1 visar en förstoring av Figur 13b i artikel [1] med röntgendifraktogram av PEG-dopad BiZn_2VO_6 med 0,10 % PEG före (blått) respektive efter (rött) fotokatalysförsök. Ovanpå de två röntgendifraktogrammen ligger diffraktogram (svarta) som är plottade med rådatan i filerna 0.1.RD (på blått) respektive Recycling.RD (på rött).



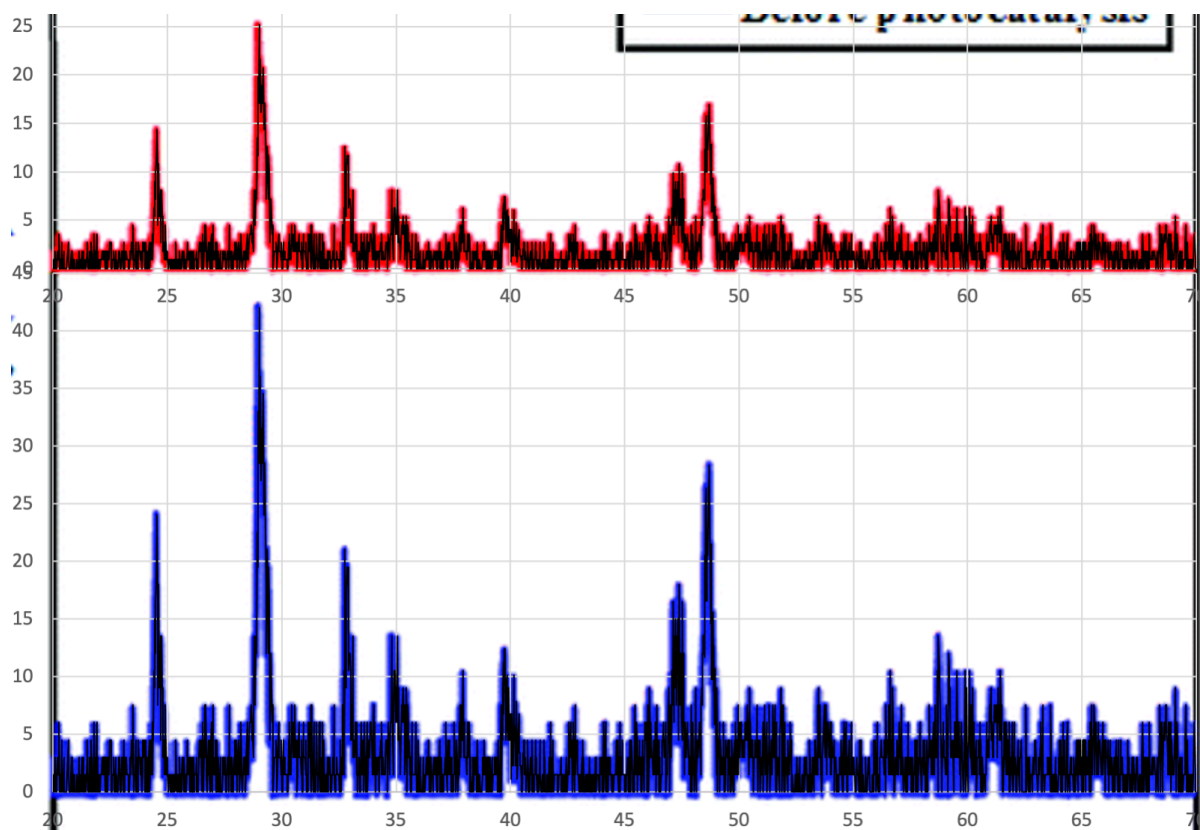
Figur 3-1. Analys av Figur 13b med diffraktogram från rådatan i filerna 0.1.RD och Recycling.RD inlagda i svart på figuren. Diffraktogrammet från 0.1.RD ligger ovanpå "Before photocatalysis" (blått) och diffraktogrammet från Recycling.RD ligger ovanpå "After photocatalysis" (rött).

För diffraktogrammen för "After photocatalysis" (rött röntgendifraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från rådatan i Recycling.RD) i Figur 3-1 är överensstämmelsen mycket god (med avseende på intensitet och 2θ-position av diffraktionstoppar och brus). Datat i filen Recycling.RD är enligt min bedömning den rådata som använts för att plotta det röda röntgendifraktogrammet för "After photocatalysis" i Figur 13b i artikel [1].

För diffraktogrammen för "Before photocatalysis" (blått röntgendifraktogram jämfört med det svarta diffraktogrammet från rådatan i 0.1.RD) är överensstämmelsen betydligt sämre (med avseende på intensitet och 2θ-position av diffraktionstoppar och brus). Dålig överensstämmelse syns tydligt t.ex. i områdena $2\theta = 26 - 28^\circ$, $44 - 47^\circ$ och $66 - 68^\circ$. Datat i filen 0.1.RD är enligt min bedömning inte den rådata som använts för att plotta det blåa röntgendifraktogrammet för "Before photocatalysis" i Figur 13b i artikel [1].

På motsvarande sätt har även datan i följande csv-filer i mappen Raw data.zip (Figur 1-1) analyserats: 0.1.csv och Recycling.csv.

Figur 3-2 visar en förstoring av Figur 13b i artikel [1] med röntgendiffraktogram av PEG-dopad BiZn_2VO_6 med 0,10 % PEG före (blått) respektive efter (rött) fotokatalysförsök. Ovanpå de två röntgendiffraktogrammen ligger diffraktogram (svarta) som är plottade med datan i filerna 0.1.csv (på blått) respektive Recycling.csv (på rött).



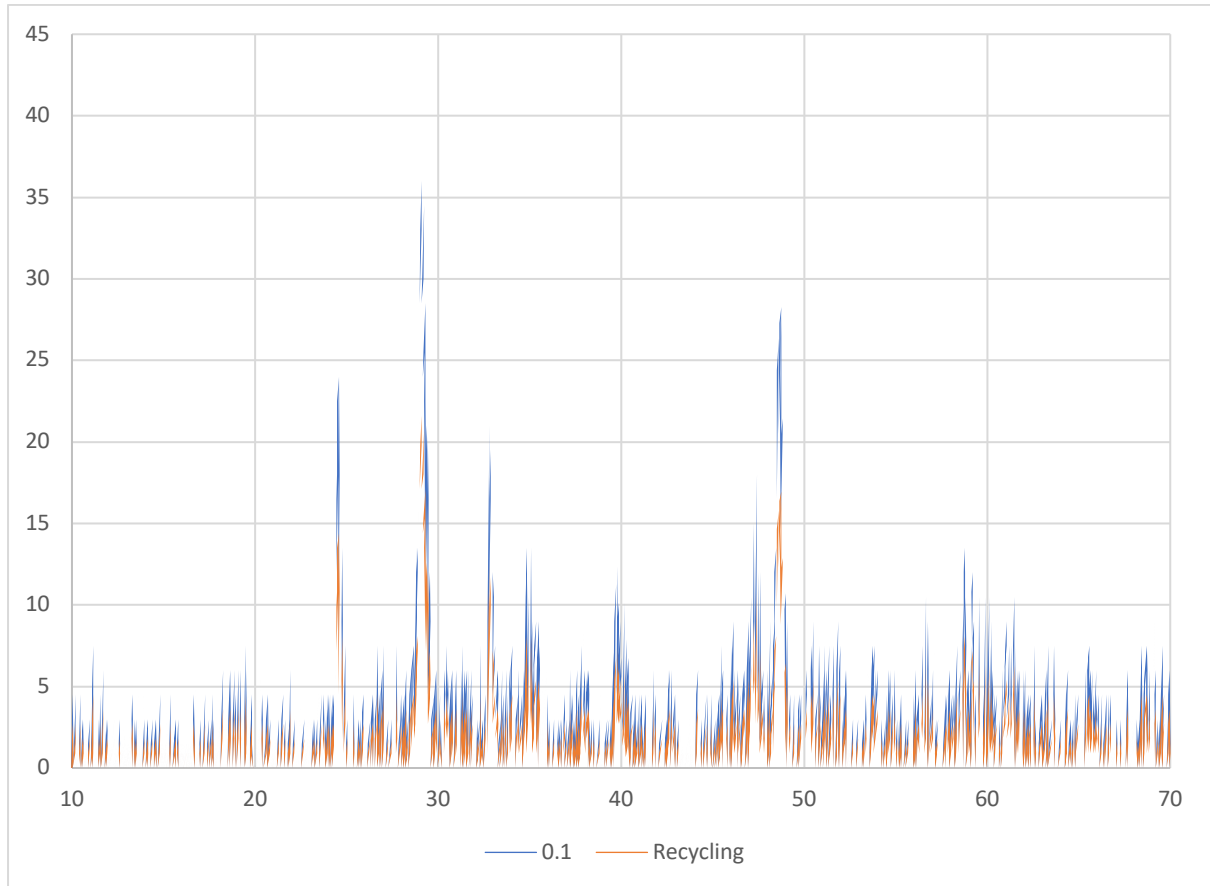
Figur 3-2. Analys av Figur 13b i artikel [1] med diffraktogram från datan i filerna 0.1.csv och Recycling.csv inlagda i svart på figuren. Diffraktogrammet från 0.1.csv ligger ovanpå "Before photocatalysis" (blått) och diffraktogrammet från Recycling.csv ligger ovanpå "After photocatalysis" (rött).

För diffraktogrammen för "After photocatalysis" (rött röntgendiffraktogram jämfört med diffraktogrammet från datan i Recycling.csv) är överensstämmelsen mycket god (med avseende på intensitet och 2θ -position av diffraktionstoppar och brus). Datat i filen Recycling.csv är enligt min bedömning den data som använts för att plotta det röda röntgendiffraktogrammet för "After photocatalysis" i Figur 13b i artikel [1]. Eftersom även överensstämmelsen med datan i filen Recycling.RD är mycket god jämfördes datan i filerna Recycling.RD och Recycling.csv. Efter division med skalningsfaktorn 1,008 är datan i Recycling.csv identisk med datan i Recycling.RD.

Eftersom datan i de två csv-filerna 0.1.csv och Recycling.csv enligt min bedömning (se ovan) är den data som använts för att plotta de bägge röntgendiffraktogrammen i Figur 13b i artikel [1] har dessa csv-filer analyserats ytterligare. Diffraktogram från datan i csv-filerna har plottats i samma figurer, dels obearbetade och dels dividerade med respektive

skalningsfaktor. Skalningsfaktorn har tagits fram genom att dividera intensiteten för diffraktionstoppen med högst intensitet (vid $2\theta = 29,01^\circ$) i filen 0.1.csv med intensiteten för diffraktionstoppen vid $2\theta = 29,01^\circ$ i filen Recycling.csv.

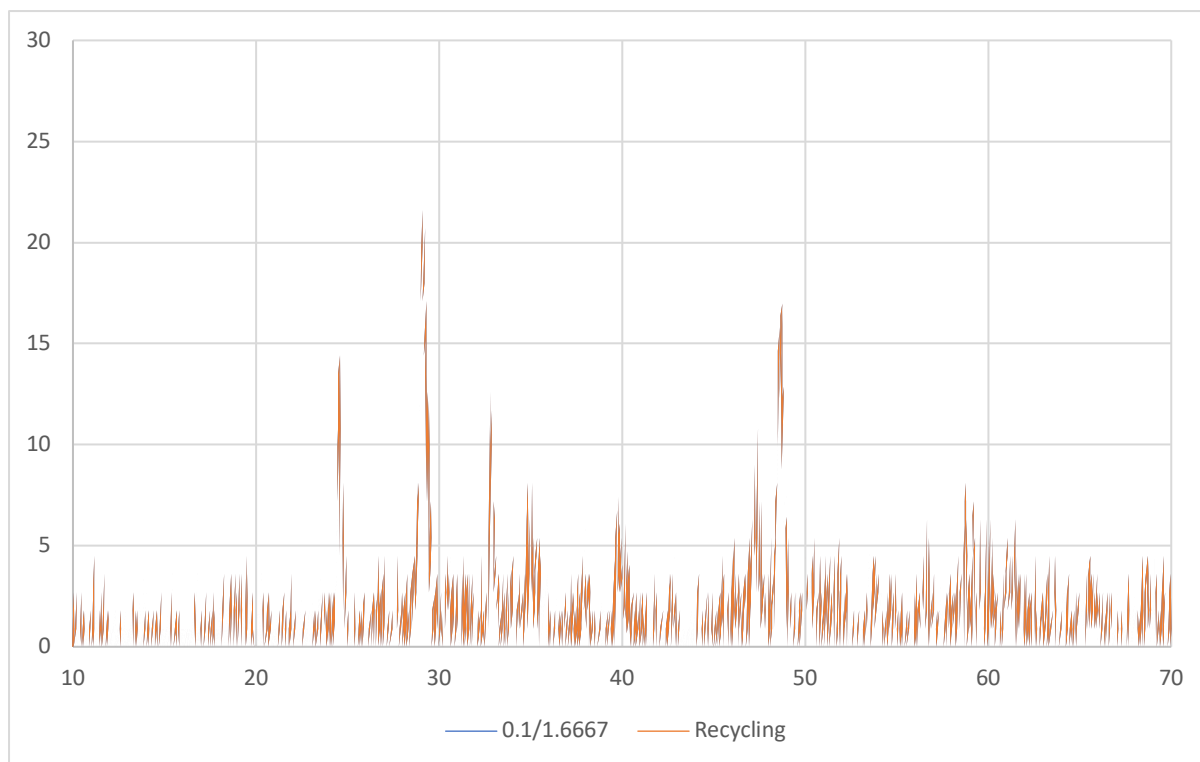
Figur 3-3 visar diffraktogrammen från datan i de bägge csv-filerna plottade i samma figur.



Figur 3-3. Diffraktogram plottade från datan i filerna 0.1.csv och Recycling.csv.

Diffraktogrammen i Figur 3-3 är förutom tydliga skillnader mellan diffraktionstopparnas absoluta intensitet mycket lika varandra med diffraktionstoppar vid samma 2θ -positioner.

Om man jämför intensiteten för diffraktionstopparna vid varje 2θ -position i de bägge filerna med motsvarande intensiteter för Recycling som referens (1,000) är skalningsfaktorn 1,667 för 0.1.csv. Figur 3-4 visar diffraktogram plottade från datan i de bägge csv-filerna dividerade med respektive skalningsfaktor.

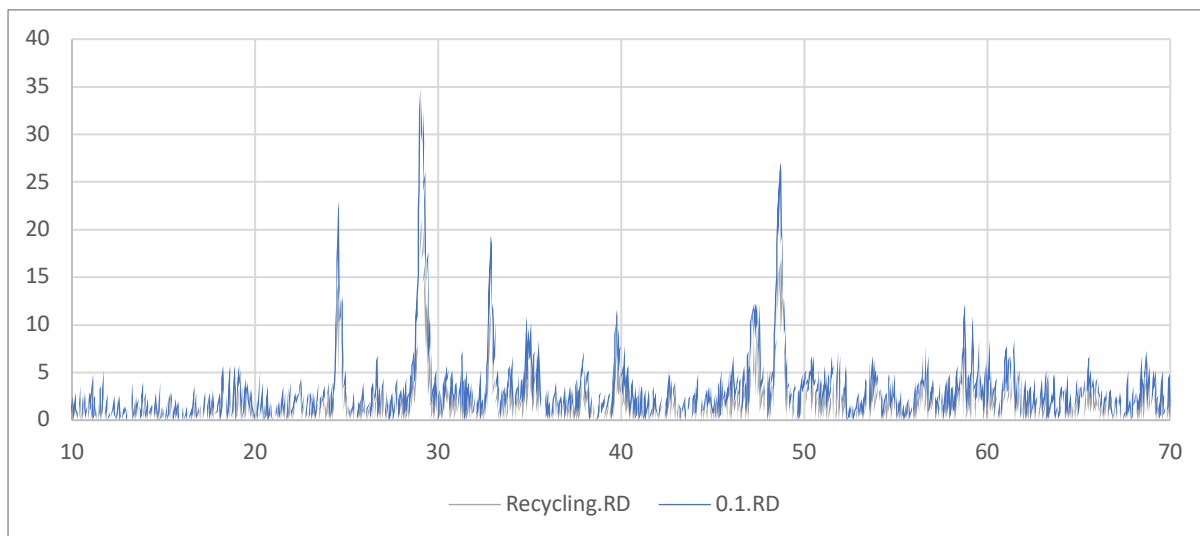


Figur 3-4. Diffraktogram plottade från datan i filerna 0.1.csv och Recycling.csv. Diffraktogrammen är dividerade med respektive skalningsfaktor; 1,667 för 0.1.csv (1,000 för Recycling.csv).

De bägge diffraktogrammen i Figur 3-4 är efter division med respektive skalningsfaktor identiska med diffraktionstoppar och brus vid exakt samma 2θ -positioner och med exakt samma intensitet. Eftersom diffraktogrammen är identiska betyder det att samma diffraktionsdata som i filen Rycycling.csv men multiplicerad med skalningsfaktorn 1,667 har använts för att få fram diffraktionsdatan i filen 0.1.csv.

På motsvarande sätt har även rådatan i de bägge RD-filerna i mappen Raw data.zip (Figur 1-1), analyserats ytterligare. Enligt min bedömning (se ovan) är datan i Recycling.RD identisk med datan i Recycling.csv som har använts för att plotta röntgendiffraktogrammet för "After photocatalysis" i Figur 13b i artikel [1]. Däremot har datan i filen 0.1.RD enligt min bedömning (se ovan) inte använts för att plotta röntgendiffraktogrammet för "Before photocatalysis" i Figur 13b i artikel [1]. Diffraktogram från datan i RD-filerna har plottats i samma figurer, dels obearbetade och dels dividerade med respektive skalningsfaktorn. Skalningsfaktorn har tagits fram genom att dividera intensiteten för diffraktionstoppen med högst intensitet (vid $2\theta = 29,01^\circ$) i filen 0.1.csv med intensiteten för diffraktionstoppen vid $2\theta = 29,01^\circ$ i filen Recycling.csv.

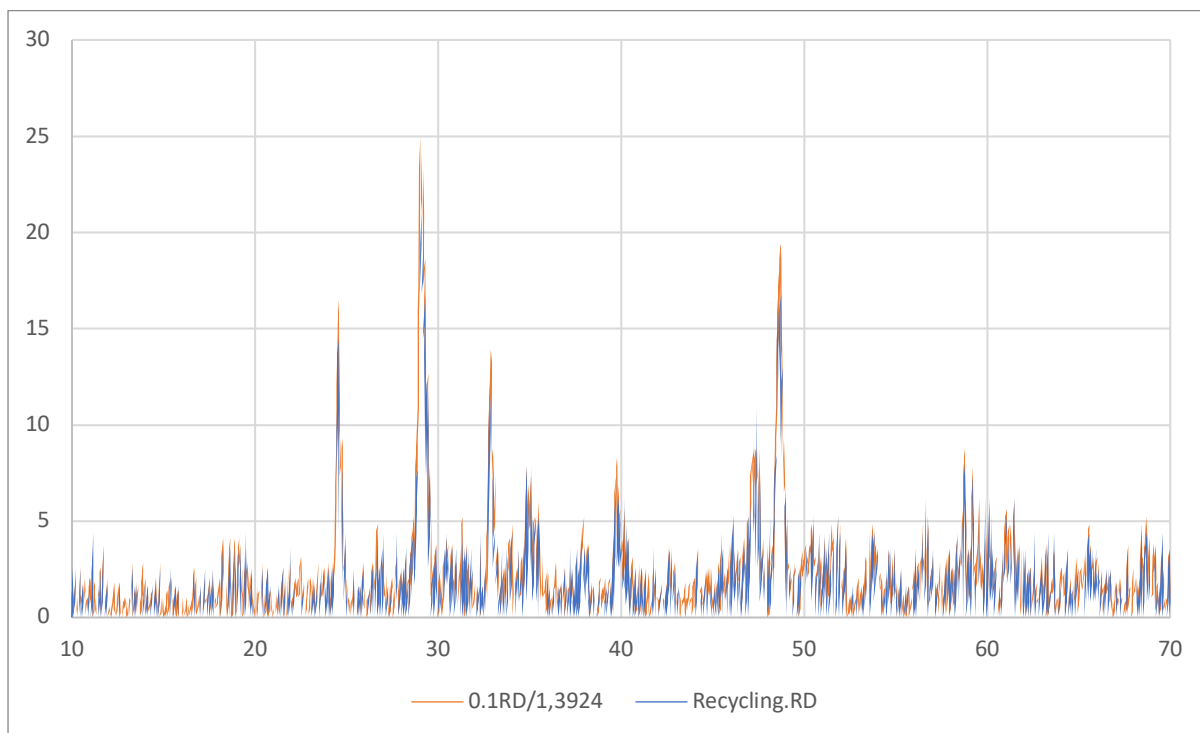
Figur 3-5 visar diffraktogrammen från datan i de bägge RD-filerna plottade i samma figur.



Figur 3-5. Diffraktogram plottade från datan i RD-filerna 0.1.RD och Recycling.RD.

De bägge diffraktogrammen i Figur 3-5 är förutom tydliga skillnader mellan diffraktionstopparnas absoluta intensitet lika varandra med diffraktionstoppar vid samma 2-theta-positioner.

Om man jämför intensiteten för diffraktionstopparna vid varje 2theta-position i de bägge filerna med motsvarande intensiteter för Recycling som referens (1,000) är skalningsfaktorn 1,3924 för 0.1.RD. Figur 3-6 visar diffraktogram från datan i de bägge RD-filerna dividerade med respektive skalningsfaktor.



Figur 3-6. Diffraktogram plottade från rådatan i filerna 0.1.RD och Recycling.RD. Diffraktogrammen är dividerade med respektive skalningsfaktor; 1,3924 för 0.1.csv (1,000 för Recycling.csv).


De bägge diffraktogrammen i Figur 3-6 är efter division med respektive skalningsfaktor mycket lika varandra med diffraktionstoppar och brus vid samma 2θ -positioner. Däremot syns tydliga skillnader i intensitet för diffraktionstoppar vid samma 2θ -positioner. Diffraktogrammen är *inte* identiska. Eftersom rådatan i RD-filerna 0.1.RD, och Recycling.RD inte är identiska kan jag konstatera att de inte kommer från samma rådata. Men som konstaterats ovan har rådatan i filen 0.1.RD inte använts för att plotta röntgendiffraktogrammen "Before photocatalysis" i Figur 13b i artikel [1].

Slutsats: Eftersom röntgendiffraktogrammen för BiZn_2VO_6 -provet före och efter fotokatalysförsök i Figur 13b i artikel [1] är *identiska* (med avseende på position och relativ intensitet mellan diffraktionstopparna för de bägge proven, absolut intensitet för en och samma topp för de två proverna dividerade med en skalningsfaktor samt, framför allt, med avseende på brus) kan de inte komma från två olika röntgendiffraktionsmätningar. Efter noggrann jämförelse med rådatan i filerna 0.1.RD och Recycling.RD är min slutsats att rådatan i Recycling.RD har använts för att plotta röntgendiffraktogrammet "After photocatalysis" i Figur 13b i artikel [1]. Rådatan i filen 0.1.RD har däremot inte använts för att plotta det andra röntgendiffraktogrammet i Figur 13b. Efter noggrann jämförelse med datan i filerna 0.1.csv och Recycling.csv kan jag konstatera att de två röntgendiffraktogrammen (Before photocatalysis och After photocatalysis) i Figur 13b i artikel [1] är plottade med datan i dessa två csv-filer. Samma diffraktionsdata som i filen Recycling.csv men multiplicerad med skalningsfaktor 1,667 har använts för att få fram diffraktionsdatan i filen 0.1.csv. Datan i denna fil är fabricerad. Minst ett av röntgendiffraktogrammen i Figur 13b i artikel [1] är därför fabricerat.

Utlåtande

De undersökta röntgendiffraktogrammen i Figur 2 och Figur 13b i artikel [1] har jämförts med avseende på absolut och relativ intensitet för diffraktionstopparna samt, framför allt, med avseende på bruset mellan diffraktionstopparna. Röntgendiffraktogrammen i de bägge figurerna har jämförts med rådata i RD-filer och data i csv-filer i mappen "Raw data.zip" som skickats till Npof den 13 september 2020. Efter noggrann jämförelse av de aktuella röntgendiffraktogrammen i de två figurerna med diffraktogram plottade från rådatan i RD-filerna och diffraktogram plottade med datan i csv-filerna är min bedömning att:

- Endast ett av de fem översta röntgendiffraktogrammen i Figur 2 och ett av de två röntgendiffraktogrammen i Figur 13b har plottats med rådatan i RD-filerna. Röntgendiffraktogrammen i de bägge figurerna är plottade med datan i csv-filerna.
- De fem översta röntgendiffraktogrammen i Figur 2 är plottade med diffraktionsdata från en och samma mätning. Skillnader i intensitet för diffraktionstoppar och brus mellan de fem diffraktogrammen beror på att diffraktionsdatan från denna mätning har multiplicerats med fyra olika skalningsfaktorer vilket gett fyra fabricerade diffraktionsdataset. Diffraktionsdatan från mätningen har tillsammans med de fyra fabricerade dataseten använts för att plotta de fem översta röntgendiffraktogrammen i Figur 2. Minst fyra av de fem översta röntgendiffraktogrammen i Figur 2 är fabricerade.
- De två röntgendiffraktogrammen i Figur 13b är plottade med diffraktionsdata från en och samma mätning. Skillnader i intensitet för diffraktionstoppar och brus mellan de bägge diffraktogrammen beror på att diffraktionsdatan från denna mätning har multiplicerats med en skalningsfaktor vilket gett ett fabricerat diffraktionsdataset. Diffraktionsdatan från mätningen har tillsammans med det fabricerade datasetet använts för att plotta de två röntgendiffraktogrammen i Figur 13b. Minst ett av de två röntgendiffraktogrammen i Figur 13b är fabricerat.



Magnus Skoglundh, Professor
Avdelningen för Tillämpad kemi
Institutionen för Kemi och kemiteknik
Chalmers tekniska högskola