

بررسی طیف‌سنجی تفرق اشعه x و کاربرد آن در جداسازی مواد

فضل احمد فروزان^{۱*}، عبدالقیوم شاداب^۲

^{۱*} - فزیک، تعلیم و تربیه، مؤسسه تحصیلات عالی غور، فیروزکوه، افغانستان (نویسنده مسئول).

Fazlahmadfrozan81@gmail.com

^۲ - فزیک، تعلیم و تربیه، مؤسسه تحصیلات عالی غور، فیروزکوه، افغانستان؛
q.shadab@ghru.edu.af

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۳/۱۰ - تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۶/۱۵ - تاریخ نشر: ۱۴۰۳/۱۲/۲۰

چکیده

با کشف اشعه ایکس و توسعه تکنیک‌های مربوط به آن، امکان مطالعه ساختار درونی کریستال‌ها به شکلی دقیق‌تر فراهم شد. طیف‌سنجی تفرق اشعه ایکس (XRD) یکی از روش‌های پرکاربرد در بررسی خصوصیات کریستال‌ها است که به دلیل سادگی تجهیزات و آماده‌سازی نمونه‌ها در بسیاری از زمینه‌های علمی و صنعتی استفاده می‌شود. این تحقیق باهدف بررسی چگونگی کاربرد روش XRD برای تعیین پارامترهای ساختاری کریستال‌ها از جمله ثابت شبکه، هندسه شبکه، تعیین فاز، اندازه کریستال و سایر خصوصیات مرتبط انجام شده است. در این پژوهش از تکنیک XRD برای تعیین پارامترهایی مانند زاویه براگ، شدت و عرض قله‌ها استفاده شد. این اطلاعات برای تحلیل ساختار کریستالی و شناسایی ترکیبات مواد به کار گرفته شدند. نتایج نشان داد که XRD قادر است اطلاعات دقیقی در مورد اندازه ذرات، ترکیبات و سایر خصوصیات ساختاری کریستال‌ها ارائه دهد. طول موج اشعه ایکس مورد استفاده در این روش معمولاً در محدوده ۰.۵ تا ۲.۵ آنگستروم بوده که امکان تحلیل دقیق ساختار مواد را فراهم می‌کند. تحلیل نتایج نشان می‌دهد که طیف‌سنجی تفرق اشعه ایکس به دلیل دقت بالا، سادگی تجهیزات و کاربردهای گسترده‌اش، یک روش مؤثر برای مطالعه و شناسایی خصوصیات کریستال‌ها به شمار می‌رود. این روش می‌تواند در زمینه‌های مختلف علمی و صنعتی به‌ویژه در علوم مواد و مهندسی مورد استفاده قرار گیرد.

کلمات کلیدی: اشعه x ، تفرق، کریستال، XRD

استناد: فروزان، فضل احمد، شاداب، عبدالقیوم. (۱۴۰۳). بررسی طیف‌سنجی تفرق اشعه x و کاربرد آن در جداسازی مواد. مجله علمی- تحقیقی مؤسسه تحصیلات عالی غور، سال اول، شماره ۱، صفحه ۱۷۵-۱۸۹.

Investigating x-ray diffraction spectroscopy and its application in material separation

Fazlahmadfrozan^{*1}, Abdulqayum Shadab²

1^{*} - Asst. Professor, Physics, Education, Ghor Institute of Higher Education, Firoz Koh Afghanistan (Corresponding Author).

Fazlahmadfrozan81@gmail.com

2 - Asst. Professor, Physics, Education, Ghor Institute of Higher Education, Firozkoh Afghanistan, q.shadab@ghru.edu.af

Received: 30/05.2024 | Accepted: 5/09/2024 | Published: 28/6/2025

Abstract

With the discovery of X-rays and the development of related techniques, the possibility of studying the internal structure of crystals in greater detail became available. X-ray diffraction spectroscopy (XRD) is one of the widely used methods for examining crystal properties, and due to its simple equipment and sample preparation, it is utilized in many scientific and industrial fields. This study aims to explore the application of the XRD method for determining crystal structural parameters such as lattice constant, lattice geometry, phase determination, crystal size, and other related properties. In this research, XRD techniques were used to determine parameters such as Bragg angle, peak intensity, and width. This information was employed to analyze the crystal structure and identify material compositions. The results indicated that XRD provides accurate information regarding particle size, compositions, and other structural characteristics of crystals. The X-rays used in this method typically have wavelengths ranging from 0.5 to 2.5 Å, enabling precise material structure analysis. The analysis of the results shows that X-ray diffraction spectroscopy, due to its high precision, simple equipment, and wide range of applications, is an effective method for studying and identifying crystal properties. This method can be utilized in various scientific and industrial fields, particularly in material science and engineering

Keywords: x-ray, diffraction, XRD and crystal

Cite this article: Frozan, F & A.Q, shadab. (2025). Investigating x-ray diffraction spectroscopy and its application in material separation. *Scientific-Research Journal of Ghor Institute of Higher Education*, 1 (1), 175-189.

۱- مقدمه

اشعه x از ابزارهای مهم در حوزه تشخیص طبی و علمی است. این شعاع‌ها به دلیل قابلیت نفوذ و جداسازی مواد بر اساس خواص کیمیاوی و فیزیکی آن‌ها، مورد توجه قرار می‌گیرند. اعتقاد بر این است که آن‌ها قادر به بهبود کیفیت تشخیص، تجزیه و تحلیل کیمیاوی می‌باشند. بنا براین، هدف این تحقیق بررسی طیف‌سنجی و کاربرد اشعه x در جداسازی مواد و تعیین قدرت آن در بهبود کیفیت تشخیص، تجزیه و تحلیل کیمیاوی است. اشعه x را ویلهلم رونتگن (*Wilhelm Rontgen 1845-1923*) در سال ۱۸۹۵م کشف کرد و آزمایش‌های اولیه تفرقی نشان داد که این اشعه از نوع امواج الکترومغناطیسی بوده که طول موج آن برابر به $1A^0 = 10^{-10}m$ می‌باشد. طبیعت موجی بودن اشعه x در سال ۱۹۰۶م متوسط مارکلا کشف شد، همچنان دانشمندان مشهور جرمنی، ماکس فون لائو (*Max Von Laue 1879-1960*) در سال ۱۹۱۳م نتیجه گرفت که می‌توان از اجسام بلورین به عنوان شبکه‌ی تفرقی سه‌بعدی در تفرق اشعه x استفاده کرد. باریکه از اشعه x هنگام برخورد با اتم‌های منفرد یک بلور، متفرق شده و امواج متفرق شده می‌تواند مانند امواجی که از شکاف‌های یک شبکه خارج می‌شوند باهم تداخل کنند. اشعه x تا اکنون برای سه مصرف اصلی رادیوگرافی، کریستالوگرافی و طیف‌سنجی فلورسانس استفاده شده است (serway, 2000).

۲- اهمیت و ضرورت تحقیق

طیف‌سنجی تفرق اشعه ایکس (XRD) یکی از ابزارهای کلیدی در مطالعه ساختار مواد کریستالی است که نقش مهمی در توسعه علوم مواد و فناوری‌های نوین دارد. با توجه به اینکه بسیاری از خواص فیزیکی و شیمیایی مواد به ساختار بلوری آن‌ها وابسته است، درک دقیق این ساختارها به کمک تکنیک‌های پیشرفته مانند XRD امری ضروری است. از طرفی دیگر، با توجه به سادگی تجهیزات و آماده‌سازی آسان نمونه‌ها، XRD به یکی از روش‌های محبوب و مقرون به صرفه برای تجزیه و تحلیل مواد در حوزه‌های مختلف علمی و صنعتی تبدیل شده است. این تحقیق از آن جهت اهمیت دارد که با تمرکز بر تکنیک XRD، به بهبود درک ما از کاربردهای این روش در تحلیل ساختار کریستال‌ها کمک می‌کند و می‌تواند راهگشای توسعه روش‌های بهینه‌تر در آنالیز مواد باشد. همچنین، با توجه به استفاده گسترده این روش در صنایع مختلف از جمله نانو مواد، مهندسی مواد و شیمی تجزیه، یافته‌های این پژوهش می‌تواند در بهبود عملکردهای صنعتی و تحقیقاتی مرتبط با خواص ساختاری مواد مؤثر واقع شود.

۳- اهداف تحقیق

بررسی کاربردهای تکنیک XRD هدف اصلی این تحقیق بررسی کاربرد طیف‌سنجی تفرق اشعه ایکس (XRD) برای شناسایی و تحلیل ساختار کریستالی مواد است. تعیین پارامترهای ساختاری کریستال‌ها تحقیق به دنبال تعیین پارامترهای کلیدی ساختاری کریستال‌ها مانند ثابت شبکه، هندسه شبکه، اندازه و فاز کریستال‌ها با استفاده از تکنیک XRD است.

تحلیل تأثیر پارامترهای مؤثر در XRD یکی از اهداف دیگر این پژوهش، بررسی پارامترهای مؤثر در طیف‌سنجی تفرق اشعه ایکس از جمله زاویه براگ، شدت و عرض قله‌ها برای شناخت بهتر ساختار کریستالی مواد است.

ارزیابی مزایای استفاده از XRD این تحقیق همچنین به ارزیابی مزایای تکنیک XRD از نظر دقت، سادگی تجهیزات و کاربردهای گسترده آن در علوم و صنایع مختلف می‌پردازد. مقایسه XRD با سایر روش‌های آنالیز ساختار کریستال هدف فرعی این پژوهش، مقایسه نتایج و مزایای XRD با دیگر روش‌های رایج تحلیل ساختار کریستال‌ها، جهت بهبود روش‌های آنالیز مواد است.

۴- پیشینه تحقیق

در حوزه مطالعه اشعه X بسیار گسترده است و به طولانی‌ترین تاریخچه‌های طبی و تحقیقی برمی‌گردد. اشعه X اولین بار توسط ویلهلم رنتگن در سال ۱۸۹۵م کشف شد، این کشف به یک انقلاب در طب و تشخیص مریضی‌ها منجر شد و امکان مشاهده داخل بدن انسان بدون نیاز به جراحی فراهم گردید. از آن زمان تاکنون، تحقیقات در حوزه اشعه X بسیار پیشرفت کرده است و این تکنالوجی بهبودهای زیادی را در تشخیص بیماری‌ها، رصد درمان‌ها و پیش‌گیری از بیماری‌ها به ما ارائه کرده است. این تحقیقات شامل استفاده از اشعه X در علوم طبی، استوماتولوژی، فزیک، شناسایی مواد و محافظت از محیط‌زیست می‌شود (Mezina and Burget, 2025).

۵- مواد و روش تحقیق

این مقاله یک تحقیق کتابخانه‌ای و مروری بوده که به معرفی اشعه X ، نحوه تولید اشعه X ، موارد استفاده اشعه X ، عمل متقابل اشعه X و اتم، اجزای تفرق و انحراف اشعه X ، روش‌های تفرق و یا

انحراف XRD، الگوی انحراف اشعه x و کاربرد آن پرداخته با توجه به این که اشعه x در رادیوگرافی، معاینات $x - ray$ ، معاینات تلویزیون و همچنان در صنعت در لابراتوارها، کارخانه‌ها و فابریکه‌های تولیدی مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این مقاله کوشش شده که بتوانیم با جزئیات با این کاربردها بپردازیم.

اطلاعات مورد نیاز این مقاله از طریق کتاب‌ها، مجلات، مقالات علمی جمع‌آوری شده و مورد استفاده قرار گرفته است.

۱- معرفی کریستال گرافی

کریستال از خانه‌های منظمی که اتم‌ها در کنج‌های آن قرار دارند تشکیل شده است. این کریستال‌ها می‌توانند امواج الکترومغناطیسی با طول موج فوق‌العاده کوتاه را متفرق کنند... با کشف اشعه x در سال ۱۸۹۵م مامکان مطالعه ساختار درونی کریستال‌ها و ارتباط آن با ساختار بیرونی فراهم شد. از این جهت طیف‌سنجی تفرق اشعه x در بررسی خصوصیات کریستال‌ها کاربرد دارد. ناحیه اشعه x در طیف الکترومغناطیسی در محدوده بین اشعه گاما γ و اشعه ماورای بنفش قرار دارد. کریستال‌ها دارای مشخصات ذیل است (امانی و دیگران، ۱۴۰۰).

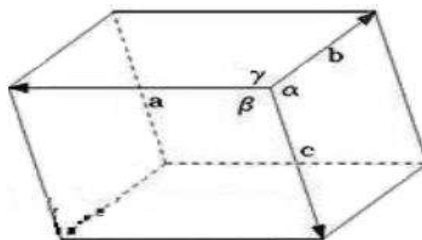
۱- کریستال‌ها دارای سطوح صاف‌اند.

۲- زوایای بین سطوح کریستالی ثابت مستقل از اندازه کریستال می‌باشد.

۳- مجموعه زوایای بین سطوح پشت سر هم در کریستال‌ها 360° درجه می‌باشد.

۴- زوایای بین سطوح در کریستال‌ها، از رسم عمود بر سطوح کریستال به دست می‌آید.

بنا بر این به کوچک‌ترین واحد کریستال‌ها که باهم نزدیک بوده و بیان گر خصوصیات بلوری است، سلول واحد گفته می‌شود. خصوصیات سلول واحد توسط پارامتر شبکه تعیین می‌شود. پارامترهای شبکه شامل طول اضلاع سلول واحد یعنی A, B, C و زوایای بین اضلاع در سلول واحد یعنی α, β, γ می‌باشند با تغییر ۶ پارامتر شبکه اشکال مختلفی ایجاد می‌شود. در سال ۱۸۴۸م آگوست براوه دانشمند فرانسوی، ثابت کرد که تنها شکل‌های خاص هندسی می‌توانند به صورت تناوب در فضا تکرار شوند و ۱۴ شبکه براوه را معرفی کرد.

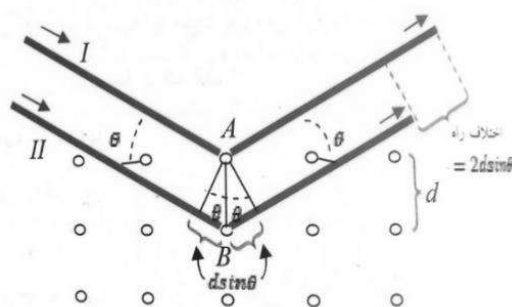


شکل (۱) نمایش سلول واحد و جذب هم حرارت (خدام، ۱۳۹۷)

اشعه x که جهت تفرق استفاده می‌شوند، معمولاً دارای طول موجی در حدود $5A^0$ الی $2.5A^0$ می‌باشد. بناءً این روش بر اساس خاصیت موجی اشعه x استوار است. با استفاده از این ناحیه طیفی می‌توانیم اطلاعات عموم کمیت ساختار کریستالی از قبیل ثابت شبکه، هندسه شبکه، تعیین کیفی مواد ناشناس، تعیین فاز کریستال‌ها، تعیین اندازه کریستال‌ها، جهت‌گیری یک کریستال، عیوب شبکه و غیره به دست آورد. همچنین طیف‌سنجی انحراف اشعه x به دلیل داشتن تجهیزات ساده و آماده‌سازی نمونه آسان روش پرکاربرد در زمینه‌های مختلف است. در XRD با تعیین پارامترهای مؤثر از جمله زاویه براگ، شدت و عرض قله‌ها و اندازه ذرات می‌توان ترکیبات را شناسایی کرد (جابر انصاری، ۱۳۹۹).

۷- تفرق اشعه x

می‌دانیم که هر کریستال از خانه‌های منظمی که اتم‌ها در کنج‌های آن قرار دارند تشکیل شده است. این کریستال‌ها قادر به تفرق امواج الکترومغناطیسی با طول موج کوتاه می‌باشند. هرگاه یک اشعه یکرنگ به یک کریستال بتابد اشعه مذکور را در تمام جهات متفرق می‌سازد. چون کریستال دارای ساختمان منظمی است، اشعه‌ی متفرق شده در بعضی جهات یکدیگر را تقویت و در برخی جهات یکدیگر را تضعیف می‌کنند اتم‌های موجود در کریستال را می‌توان در صفحات موازی نیز در نظر گرفت فاصله این صفحات نسبت به شیوه در نظر گرفتن آن‌ها تغییر می‌کند (شریفی، ۱۳۹۷).



شکل (۲) تفرق اشعه x در کریستال مکعبی (شریفی، ۱۳۹۷)

بررسی راجع به این صفحات فرضی که یک سلسله اتم‌ها در آن قرار می‌گیرند، اولین بار توسط براگ (W.L.Bragg) صورت گرفت. این صفحات، بنام صفحات براگ نامیده می‌شوند.

یک دسته اشعه x با طول موج λ تحت زاویه θ به یک دسته صفحات براگ که فاصله آن‌ها d است، می‌تابد. اشعه x اتم A در صفحه اول و اتم B در صفحه دوم را تحریک می‌کند. این دو اتم اشعه الکترومغناطیسی را در جهات مختلف منتشر می‌کنند. شعاعات وقتی یکدیگر را تقویت می‌کنند که اولاً موازی باشند و ثانیاً تفاوت راه اپتیکی آن‌ها دقیقاً مضرب صحیحی از طول موج $(\lambda, 2\lambda, 3\lambda, \dots)$ (یا به طور کلی $m\lambda$) باشد. این شرایط در مورد دودسته اشعه‌ی ۱ و ۲ شکل (۲)

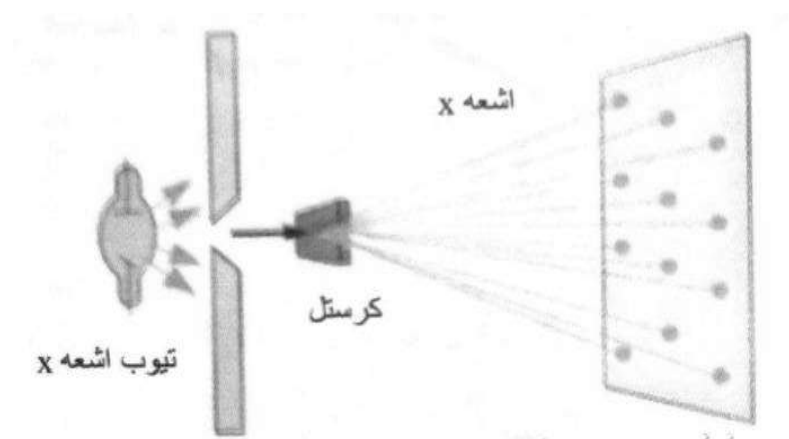
$$2d\sin\theta = m\lambda \dots \dots \dots (1)$$

صادق است. از شرط اول نتیجه می‌شود که باید زاویه‌ی که اشعه تحت آن متفرق می‌شود مساوی به زاویه تابش اشعه x باشد. از شرط دوم نتیجه می‌شود که:

دیده می‌شود که اشعه ۲ به اندازه $2d\sin\theta$ از مسیر اشعه ۱ بیشتر است. کمیت $2d\sin\theta$ قانون براگ یاد می‌گردد (قالیچه چیان، ۱۳۶۸)

فریدریش نیپینگ در اولین تجربه روی تفرق اشعه x ، دو فرضیه را مورد بررسی قرار داد. یکی موجی بودن اشعه x دوم اینکه اتم‌ها بلورها در یک شبکه‌ی منظم جا گرفته‌اند. این بود که بعداً از این پدیده در کشف چگونگی ساختار کریستال‌ها استفاده به عمل آمد و به عنوان ابزار تحقیقات پرارزشی در زمینه‌ی اندازه‌گیری طول موج شناخته شدند. در شکل (۳) به خوبی دیده می‌شود که

برخورد اشعه x با کریستال چگونه روی صفحه‌ی تفرقی، نقش تفرقی را به وجود می‌آورد. هر کریستال از خانه‌های منظم که اتم‌ها در کنج‌های آن قرار دارند، تشکیل شده است. تجارب بعدی با اندازه‌گیری‌های متعدد، الکترومقناطیسی بودن اشعه x را ثابت نمود (Kelly Dave, 2001)

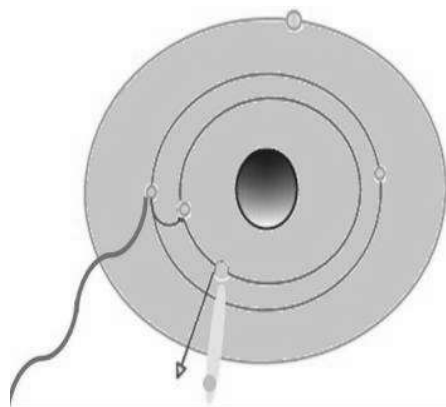
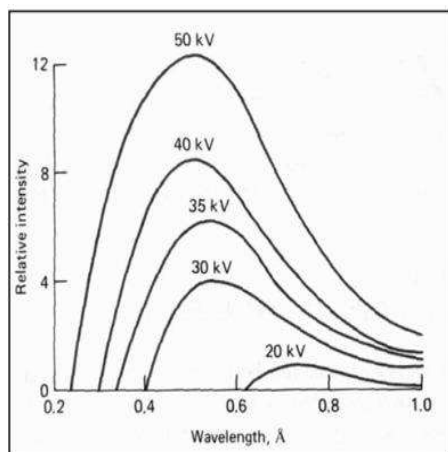


شکل (۳) دیاگرام طرز مشاهده تفرق اشعه x توسط یک کریستال (شریفی، ۱۳۹۷)

۸- نحوه تولید اشعه x

جدا شدن الکترون‌های پرسرعت از مدارهای الکترونی در اتم باعث ایجاد اشعه ایکس می‌شود که این پدیده با برقراری اختلاف پتانسیل بین دو الکترون منفی و مثبت اتفاق می‌افتد. قطب مثبت سیم فلزی بسیار داغ است. با عبور جریان برقی، الکترون‌ها از سطح مثبت به خارج از آن پرتاب می‌گردد. در طرف مقابل چارچ مثبت چارچ منفی وجود دارد اختلاف زیاد در بین چارچ‌های مثبت و منفی که الکترون‌ها از سطح کتود به انود پرتاب شوند (نارویی و نبوی، ۱۳۹۸). این الکترون‌های پرانرژی باعث می‌شود که یکی از الکترون‌های لایه نزدیک به هسته‌اتم، از مدار خود خارج شود. در این حالت، هسته‌اتم مجبور می‌شود یکی از الکترون‌های لایه بالا را به طرف خود جذب کند. با افتادن این الکترون از لایه بالاتر به لایه پائین تر، انرژی اضافی آن به صورت فوتون‌های نور آزاد می‌شوند؛ که این فوتون‌ها عبارت از اشعه x هستند. (شکل ۴ الف) از آنجایی که الکترون‌ها دارای سرعت‌های متفاوتی هستند، اشعه x تولیدشده طیف پیوسته‌ای را می‌دهد که با سرعت الکترون وابسته است. همچنین شدت اشعه x تولیدشده به اختلاف پوتنشیل بین

چارچ‌های مثبت و منفی وابسته است هر قدر اختلاف پوتنسیل بین مثبت و منفی بیشتر باشد، شدت اشعه X تولید شده بیش تر خواهد بود (شکل ۴ ب)



شکل (۴-ب) طیف پیوسته اشعه X را نشان میدهد (خدام، ۱۳۹۷).

شکل (۴-الف) نحوه تولید اشعه X میباشد (خدام، ۱۳۹۷).

۹- عمل متقابل اشعه X و اتم زمانی که اشعه X با یک اتم و یا مالیکول برخورد می‌کند، الکترون‌های اتم یا مالیکول مورد نظر اهتزاز نموده و از خود امواج الکترومغناطیس پخش خواهند کرد. این اهتزاز باعث تابش امواج جدید خواهند شد. حال اگر این فرکانس نور تابیده شده با فریکانس نور بازتابیده دومی باهم برابر باشند، این پدیده را بنام تفرق ریلی می‌نامند. از دیدگاه کوانتم، امواج الکترومغناطیس از فوتون تشکیل شده است که انرژی فوتون طبق رابطه ذیل دریافت می‌گردد.

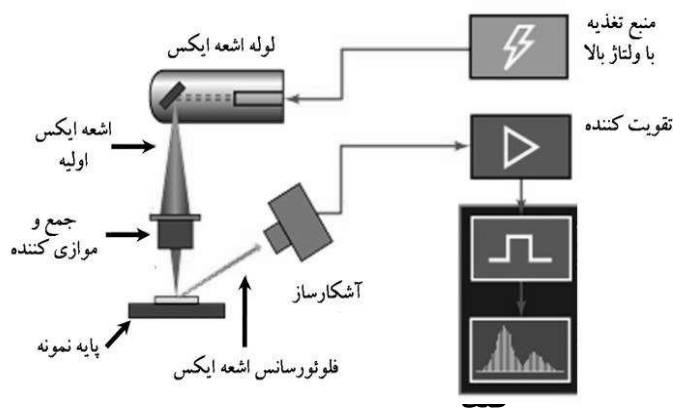
$$E = h \cdot \nu \quad (2)$$

با توجه با فریکانس نور در پراکندگی ریلی تغییر نمی‌کند، پس انرژی فوتون‌های طاقه تغییر نمی‌کنند. اساس کار XRD را پراکندگی ریلی در صفحات کریستال می‌باشد.

۱۰- اجزای تشکیل دهنده طیف سنجی اشعه X

دستگاه XRD معمولاً از منبع انرژی با ولتاژ بالا، لوله تولید کننده اشعه X ، نگهدارنده نمونه، توازن دهنده‌های طیف‌های تابشی حاصل از نمونه، بلور فلوئور سدیم یا بلورهای دیگر، توازن دهنده‌های طیفی بعد از عبور از بلور فلوئور سدیم، دستگاه شمارش برای اندازه گیری شدت اشعه X با

طول موج‌های مختلف برای عناصر گوناگون، ثبت کننده قوی و تقویت کننده الکترونی تشکیل شده است. شکل (5) طرح‌واره‌ای از دستگاه فلورسانس اشعه ایکس را نشان می‌دهد.



شکل (۵) دستگاه طرح وار فلورسانس اشعه ایکس (Kelly, 2001)

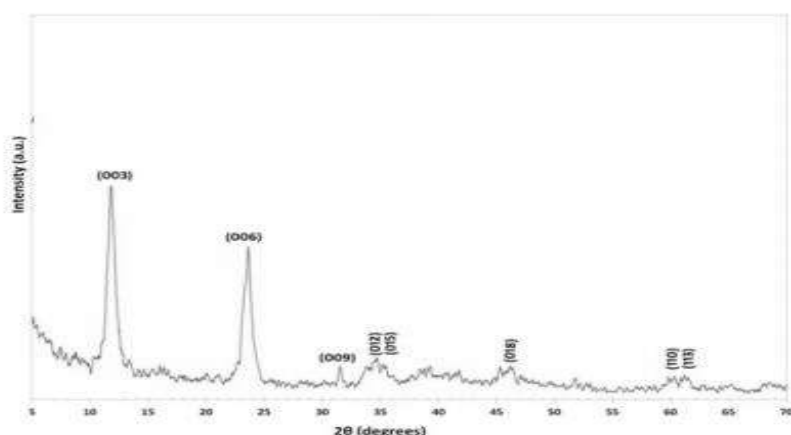
نمونه با استفاده از اشعه ایکس اولیه تولید شده در لوله اشعه ایکس، بمباران می‌شود و انتقال الکترونی انجام و اشعه ایکس ثانویه که شعاع مشخصه عنصرهای موجود در نمونه مجهول است؛ تولید می‌شود. این اشعه ایکس ثانویه، بعد از عبور از جمع کننده (Collimator)، به سمت بلوری که در بخش آشکارساز قرار دارد؛ هدایت می‌شود.

جمع کننده متشکل از چند ورقه موازی است که با جمع و موازی کردن اشعه ایکس، آن را وادار به حرکت موازی و برخورد با زاویه مشخص به بلور می‌کند. اشعه برخورد کننده به بلور در واقع گستره‌ای از طول موج‌ها را دارا است که هر یک به یک عنصر تعلق دارد؛ بنابراین، پیش از ارسال گستره طول موج‌ها به آشکارساز بایستی با استفاده از بلور، تفکیک شوند.

بلور آنالیز کننده، بر اساس رابطه براگ، منجر به تفرق هر یک از طول موج‌ها در زاویه مشخصی می‌شود و سپس این طول موج‌های تفرق شده، به آشکارساز فرستاده می‌شوند. از آنجایی که در هر زاویه، یک طول موج ویژه در رابطه براگ صدق می‌کند؛ با تفرق یک طول موج، بقیه طول موج‌ها در فضای اطراف بلور پخش شده و از بین می‌روند. سپس، اشعه ایکس تفکیک شده، بعد از عبور از جمع کننده ثانویه، به داخل آشکارساز هدایت می‌شود. آشکارساز و جمع کننده بر روی یک دایره هستند و بلور در مرکز آن قرار دارد. در آشکارساز، شدت اشعه ایکس ثانویه برای هر طول موج تعیین می‌شود و در نهایت اطلاعات به دست آمده به قسمت ثبت کننده فرستاده می‌شود (Bunaciu et al, 2015).

۱۱- الگوی انحراف اشعه x

الگوی انحراف اشعه x را برای یک نمونه پودری به صورت تابعی از زاویه نشان می‌دهد. توضیح این امر مربوط به خاصیت موجی اشعه ایکس و آرایش تناوبی بلورها است. طوری که در شکل (۴) دیده می‌شود، برای یک گراف کریستالی قله‌های متعددی در زوایای مختلف و با شدت‌های متفاوت وجود دارد. هر کدام از این قله‌ها مربوط به موجی اشعه ایکس و خاصیت تناوبی بلورها می‌باشد. هر کدام از این قله‌ها مربوط به صفحه‌های خاص از نمونه می‌باشد. زاویه هر قله وابسته به فاصله بین صفحه و شدت قله مربوط به آرایش اتم‌ها در صفحات می‌باشد. همچنین شدت اشعه متفرق شده به جنس، تعداد و نحوه توزیع اتم‌ها در صفحات نمونه بستگی دارد. ضخامت هر قله نیز حاوی اطلاعاتی از نمونه می‌باشد. دلایل زیاد در زیاد شدن ضخامت‌ها تأثیرگذار می‌باشد می‌توان به تأثیرات وسایل آزمایش گاهی، میکروکرنش‌ها، اثرات حرارتی، اندازه حوزه‌های کریستالی، نا هم آهنگی پودر نمونه و غیره اشاره کرد (Ameh, 2019).



شکل (6) نمونه انحراف اشعه x (خدام، ۱۳۹۷)

۱۲- کاربردهای XRD

یکی از اساسی‌ترین کاربرد XRD تعیین فاز می‌باشد که در صنعت مورد استفاده قرار می‌گیرد. اشعه x در سال ۱۸۹۵م کشف شده و تا اکنون برای سه مورد عمده استفاده قرار می‌گیرد که ذیلاً به آن‌ها اشاره می‌شود.

۱۲-۱- دستگاه رادیوگرافی اشعه ایکس ($x - ray radiography$) جهت تصویربرداری از اجسام که از خود نور را عبور نمی‌دهند مورد استفاده قرار می‌گردد. از اشعه x جهت تشخیص مشخصات کریستالی مواد استفاده می‌شود.

۱۲-۲- کریستالوگرافی اشعه ایکس (x-ray crystallography) از طبیعت موج ذره اشعه x جهت تشخیص مشخصات کریستالی مواد مورد استفاده قرار می گیرد.

۱۲-۳- طیف فلورسانس اشعه x (x-ray fluorescence soectrometry) از خاصیت به را انگیخته شدن مواد و تابش دومی آن ها در اثر پهلوی هم قرار گرفتن اشعه x جهت ترکیبات کیمیای مواد استفاده می شود (خدام، ۱۳۹۷).

ناگفته نباید گذشت که اشعه x دارای مزایا و معایب نیز می باشد که یکی از مزایا XRD روش غیر تماسی و غیر مخرب می باشد و نیاز به آماده سازی ندارد. یکی از معایب XRD را می توان به رزولوشن و تفکیک پایین و همچنان شدت کم اشعه متفرق شده نسبت به تفرق الکترونی نام برد. شدت اشعه متفرق شده در XRD وابسته به عددی اتمی می باشد. برای عناصر سبک تر این شدت کمتر بوده و کار را مشکل می کند (Ameh, 2019).

۱۳- روش تحلیل داده ها

برای تحلیل داده ها برنامه ی به نام *SUITE FULLPROF* است که برای انجام دادن انواع متنوع از آنالیزها و تحلیل روی انواع الگوهای تفرق اشعه x یا تفرق نیوترونی و... استفاده می شود. برای شروع تحلیل در این برنامه، دو فایل نیاز است یک فایلی که از الگوی تفرق اشعه x به دست آمده و معمولاً دارای فرمت *Xrdml* بوده و نشان دهنده قله های مربوط به ساختار ماده ی موردنظر که به قله های براگ مشهور است می باشد و از تحلیل آن نوع ساختار، گروه فضای و پارامترهای شبکه ماده موردنظر را به دست آورد. این فایل را بعداً به صورت *dat* در آورده می شود.

دوم آن مربوط به فایل است که دارای فرمت *PCR* بوده و نشان دهنده اطلاعات مربوط به مدل ساختاری است. این فایل حاوی تمام اطلاعات ورودی مانند گروه های فضایی، پارامترهای ثابت، نوع تابع زمینه، ضرایب W, V, U نوع اتم ها و نحوه تنظیم و در صد اشغال آن ها در شبکه موردنظر،... می باشد.

نتیجه گیری

تکنیک طیف سنجی تفرق اشعه ایکس (XRD) به عنوان یک ابزار حیاتی در تحلیل ساختار کریستال ها و مواد، اهمیت فراوانی دارد. این تحقیق نشان داد که XRD، به دلیل سادگی تجهیزات و سرعت بالا در ارائه نتایج، یک روش بسیار مؤثر و پر کاربرد در حوزه های مختلف علمی و صنعتی است.

با استفاده از XRD، می توان به دقت پارامترهای ساختاری کریستال ها از جمله ثابت شبکه، هندسه شبکه، اندازه و فاز کریستال ها را تعیین کرد. نتایج نشان می دهند که این تکنیک قادر است اطلاعات ارزشمندی درباره ساختار مواد با دقت بالا و در زمان کوتاه ارائه دهد. پارامترهایی مانند زاویه براگ، شدت و عرض قله ها نقش کلیدی در شناسایی و تحلیل مواد دارند.

در حوزه های مختلف، از جمله پزشکی، صنعت و عکاسی، XRD و اشعه ایکس به دلیل ویژگی های غیر مخرب بودن و قابلیت های دقیق، کاربردهای گسترده ای دارند. در پزشکی، این تکنیک برای انجام معاینات رادیوگرافی و تصویربرداری های پزشکی استفاده می شود. در صنعت، در آزمایشگاه ها و کارگاه های تولیدی به کار می رود و در عکاسی نیز برای ثبت تصاویر و شناسایی مواد کاربرد دارد.

به طور کلی، این تحقیق تأکید می کند که استفاده از تکنیک XRD می تواند به بهبود فرآیندها و نتایج در تحلیل ساختار مواد کمک شایانی کند و به عنوان ابزاری کارآمد در شناسایی و تحلیل دقیق مواد در زمینه های مختلف علمی و صنعتی شناخته می شود.

منابع

- امانی، نغمه، ویسی، رامین، عبادی، سید اسحاق و کیانی، مجید. (۱۴۰۰). شناسایی برخی اجزای لجن با استفاده از فنون کروماتوگرافی گازی-طیف سنجی جرمی (MS/GC) و تفرق اشعه ایکس (XRD). پژوهش‌های علوم و فناوری چوب و جنگل، ۲۸(۲)، ۳۹-۵۸.
- جابر انصاری، مصطفی. (۱۳۹۹). اشعه ایکس (برگرفته از کتاب تاریخ مصور جراحی) (تاریخ جراحی). نشریه جراحی ایران، ۲۸(۱ و ۲)، ۷۹-۸۶. SID. <https://sid.ir/paper/525992/fa>
- خدا، ف. (1397). طیف‌سنجی تفرق اشعه نشریه روی‌کردهای نوین آزمایشگاه‌های علمی ایران.
- شریفی، م. (1397). /پتیک. کابل افغانستان: نویسا.
- عزیزی، ع. (1397). فزیک /تم و هسته. کابل افغانستان: نویسا.
- قالیچه چیان، ی. (1368). فزیک مدرن. تهران: موسسه انتشارات امیر کبیر.
- نارویی، افسون و نبوی، حمیدرضا. (۱۳۹۸). روش‌های آماده سازی نمونه در آنالیز به روش طیف سنجی فلورسانس اشعه ایکس. دانش آزمایشگاهی ایران، ۷(۳) (پیاپی ۲۷)، ۷-۱۲. SID. <https://sid.ir/paper/269048/fa>
- Ameh, E. S. (2019). A review of basic crystallography and x-ray diffraction applications. *The international journal of advanced manufacturing technology*, 105(7), 3289-3302
- Bunaciu, A. A., Udriștioiu, E. G., & Aboul-Enein, H. Y. (2015). X-ray diffraction: instrumentation and applications. *Critical reviews in analytical chemistry*, 45(4), 289-299.
- Fazeli, Reza, and Tizero, Sasan. (2017). X-ray enhancement in laser irradiation of metals for use in high-resolution X-ray microscopy: effect of initial target density. *Laser in Medicine*, 15(3), 22-30. SID. <https://sid.ir/paper/523681/fa>
- Kelly, D. (2001). *Physics*. London : Hrper Collins limited.
- Mezina, A., & Burget, R. (2024). Detection of post-COVID-19-related pulmonary diseases in X-ray images using Vision Transformer-based

neural network. *Biomedical Signal Processing and Control*, 87, 105380

Serway, R. (2000). *Physic for scientist and Engineers with modern physic*. Thomas Learning In