

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

**آنالیز کیفی پراش اشعه‌ی ایکس
با استفاده از نرم‌افزار
X'Pert HighScore Plus**

تألیف و ترجمه:

دکتر قاسم دینی

عضو هیأت علمی دانشگاه اصفهان

اعظم فاطمی

دانشگاه اصفهان

۱۳۹۷

سرشناسه	: دینی، قاسم، ۱۳۵۷ -
عنوان و نام پدیدآور:	: آنالیز کیفی پراش اشعه ی ایکس با استفاده از نرم افزار X`Pert Highscore Plus
مشخصات نشر	: تالیف و ترجمه قاسم دینی، اعظم فاطمی اصفهان: دانشگاه اصفهان، ۱۳۹۷.
مشخصات ظاهری	: ۲۱۴ ص: مصور، جدول، نمودار.
شابک	: ۹۷۸-۶۰۰-۱۱۰-۱۵۲-۶
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
فروست	: دانشگاه اصفهان، ۶۸۷.
موضوع	: اشعه ایکس -- پراش -- نرم افزار
موضوع	: X-rays -- Diffraction -- Software
موضوع	: بلورشناسی با اشعه ایکس
موضوع	: X-ray crystallography
موضوع	: طیف نمایی اشعه ایکس
موضوع	: X-ray spectroscopy
شناسه افزوده	: فاطمی، اعظم، ۱۳۶۹ -
شناسه افزوده	: دانشگاه اصفهان
شناسه افزوده	: دانشگاه اصفهان. انتشارات
شناسه افزوده	: University of Isfahan
رده بندی کنگره	: QC۴۸۲/۵ ۹۱۸ ۱۳۹۷
رده بندی دیویی	: ۵۴۸/۸۳
شماره کتابشناسی ملی	: ۵۳۳۵۲۲۵



انتشارات دانشگاه اصفهان

عنوان کتاب: آنالیز کیفی پراش اشعه ی ایکس با استفاده از نرم افزار X`Pert Highscore Plus

تألیف و ترجمه: قاسم دینی، اعظم فاطمی

ناشر: دانشگاه اصفهان

نوبت چاپ: چاپ اول - تابستان ۱۳۹۷

شمارگان: ۱۰۰۰ نسخه

چاپ و صحافی: چاپخانه دانشگاه اصفهان

قیمت: ۱۵۰/۰۰۰ ریال

کلیه حقوق نشر برای ناشر محفوظ است

مراکز فروش کتاب:

اصفهان: میدان آزادی - خیابان دانشگاه - فروشگاه کتاب دانشگاه اصفهان

تلفن: ۰۳۱ - ۳۷۹۳۲۱۷۷

پُست الکترونیکی: Press@ui.ac.ir

تهران: میدان انقلاب - خیابان شهید لبافی نژاد - بین ۱۲ فروردین و اردیبهشت - پلاک ۲۳۸

مؤسسه کتابیران، مرکز پخش کتاب‌های دانشگاهی - تلفن: ۰۹ - ۶۶۴۹۴۴۰۹ - ۶۶۴۱۱۱۷۳ - ۰۲۱

فهرست مطالب

پیشگفتار.....	۵
فصل ۱: پراش اشعه‌ی ایکس: از ابتدا تا به امروز.....	۱
۱-۱ مقدمه.....	۱
۲-۱ رویدادهای قبل از کشف پراش اشعه‌ی ایکس.....	۴
۳-۱ کشف پراش اشعه‌ی ایکس.....	۵
۴-۱ توسعه‌ی تئوری پراش اشعه‌ی ایکس.....	۶
۵-۱ شروع مطالعه‌ی پراش اشعه‌ی ایکس.....	۱۰
۶-۱ مطالعات وولف.....	۱۱
۷-۱ توسعه‌ی آنالیز پراش اشعه‌ی ایکس کریستال‌ها.....	۱۲
۸-۱ رویکردهای مدرن در توسعه‌ی تحقیقات اشعه‌ی ایکس.....	۱۶
فصل ۲: ساختار کریستالی مواد و پراش اشعه ایکس.....	۲۵
۱-۲ مقدمه.....	۲۵
۲-۲ ساختار کریستالی مواد جامد.....	۲۵
۳-۲ شبکه‌های چهارده‌گانه‌ی براوه.....	۲۷
۴-۲ صفحه‌های کریستالی.....	۲۹
۵-۲ فاصله‌ی بین صفحه‌های موازی.....	۳۱
۶-۲ شبکه‌های مهم کریستالی.....	۳۱
۱-۶-۲ شبکه‌ی مکعبی مرکزدار (BCC).....	۳۱
۲-۶-۲ شبکه‌ی مکعبی با وجوه مرکزدار (FCC).....	۳۳
۳-۶-۲ شبکه‌ی هگزاگونال فشرده.....	۳۴
۷-۲ شبکه‌ی کریستالی ترکیبات.....	۳۵
۱-۷-۲ فضای خالی شش وجهی.....	۳۵
۲-۷-۲ فضای خالی هشت وجهی.....	۳۵
۳-۷-۲ فضای خالی چهار وجهی.....	۳۵

- ۲-۸ فضاهای خالی در برخی از شبکه‌های کریستالی ۳۵
- ۲-۸-۱ شبکه‌ی FCC ۳۵
- ۲-۸-۲ شبکه‌ی BCC ۳۷
- ۲-۸-۳ شبکه‌ی مکعبی ساده ۳۹
- ۲-۹-۱ ساختمان کریستالی چند ترکیب مهم ۳۹
- ۲-۹-۲ ترکیبات با ساختمان AX ۳۹
- الف) ساختمان‌های AX از نوع کلرید سزیم (CsCl) ۳۹
- ب) ساختمان‌های AX از نوع کلرید سدیم (NaCl) ۴۰
- ج) ساختمان‌های AX از نوع ZnS ۴۰
- د) ساختمان‌های AX با شبکه غیر مکعبی ۴۱
- ۲-۹-۲ ترکیبات با ساختمان A_mX_p ۴۲
- ۲-۹-۳ ترکیبات با ساختمان $A_mB_nX_p$ ۴۳
- ۲-۱۰ پراش اشعه‌ی ایکس ۴۴
- ۲-۱۱ قانون براگ ۴۴
- ۲-۱۲ روش‌های آزمایشگاهی مطالعه‌ی کریستال‌ها توسط پراش اشعه‌ی ایکس ۴۷
- ۲-۱۲-۱ روش دبی-شرر ۴۸
- ۲-۱۲-۲ روش پراش سنجی ۴۹
- ۲-۱۳ شدت اشعه‌ی ایکس پراش یافته ۵۱
- ۲-۱۳-۱ پراکندگی توسط یک الکترون ۵۱
- ۲-۱۳-۲ پراکندگی توسط یک اتم ۵۱
- ۲-۱۳-۳ پراکندگی توسط واحد شبکه ۵۳
- ۲-۱۳-۴ محاسبه‌ی فاکتور ساختمانی برای چند شبکه‌ی کریستالی ۵۴
- الف) شبکه‌های ساده ۵۴
- ب) شبکه‌های مرکزدار ۵۴
- ج) شبکه‌ها با وجوه مرکزدار ۵۵
- ۲-۱۴ دیگر پارامترهای مؤثر بر شدت اشعه‌ی ایکس پراش یافته ۵۶
- ۲-۱۴-۱ فاکتور تعدد صفحات ۵۷
- ۲-۱۴-۲ فاکتور لورنز ۵۷
- ۲-۱۴-۳ فاکتور جذب ۶۰
- ۲-۱۴-۴ فاکتور دما ۶۰
- فصل ۳: آنالیز کیفی پراش اشعه‌ی ایکس ۶۳**
- ۳-۱ مقدمه ۶۳
- ۳-۲ آنالیز کیفی الگوی XRD چیست؟ ۶۳
- ۳-۳ مفهوم فاز در XRD ۶۵
- ۳-۴ اساس آنالیز کیفی الگوی XRD ۶۶
- ۳-۴-۱ روش هاناوال و روش فینک ۶۹
- ۳-۴-۲ روش کامپیوتری ۷۲
- ۳-۵ پایگاه داده ۷۳
- ۳-۶ تهیه‌ی الگوی آزمایشگاهی با کیفیت، قدم اول در فازیابی موفق ۷۴

۷۵	۳-۶-۱ آماده‌سازی نمونه
۷۵	- ویژگی‌های یک نمونه‌ی پودری مناسب
۷۷	- گذاشتن نمونه در نگه‌دارنده (مانت کردن پودر)
۷۹	- مقدار نمونه
۷۹	- ضخامت نمونه
۸۰	- قرار دادن نمونه در دستگاه پراش سنج
۸۰	۳-۶-۲ پارامترهای انجام آزمون
۸۱	- طول موج
۸۳	- تک‌فام ساز
۸۳	- اپتیک اشعه ایکس در دستگاه پراش سنج
۸۴	- تنظیمات توان تیوب اشعه ایکس
۸۶	- سرعت انجام آزمون
۸۷	- دامنه‌ی آزمون
۸۸	۳-۶-۳ معیارهای ارزیابی کیفیت الگو
۹۱	۳-۷-۱ مراحل انجام یک آنالیز کیفی (فازیابی) توسط نرم‌افزار
۹۲	۳-۷-۱ آماده‌سازی الگو
۹۲	- تعیین زمینه
۹۴	- مشخص کردن پیک‌ها
۹۵	- حذف بخش $K\alpha_2$
۹۶	- صاف کردن الگو
۹۷	۳-۷-۲ فازیابی
۱۰۲	۳-۸-۱ مشکلات و محدودیت‌های آنالیز کیفی الگوی XRD
۱۰۳	۳-۸-۱ حد تشخیص
۱۰۵	۳-۸-۲ ضریب جذب
۱۰۶	۳-۸-۳ فازهای ناشناخته
۱۰۷	۳-۸-۴ فاز آمورف
۱۰۸	۳-۸-۵ محلول جامد
۱۱۰	۳-۸-۶ بافت
۱۱۱	۳-۸-۷ عمق نفوذ اشعه ایکس
۱۱۳	فصل ۴: نصب و آماده‌سازی نرم‌افزار
۱۱۳	۴-۱ مقدمه
۱۱۳	۴-۲ نصب نرم‌افزار
۱۱۳	۴-۲-۱ تهیه‌ی نرم‌افزار X'Pert
۱۱۴	۴-۲-۲ نصب نرم‌افزار X'Pert HighScore Plus
۱۱۵	۴-۳ پایگاه داده
۱۱۵	۴-۳-۱ تهیه‌ی پایگاه داده
۱۱۵	۴-۳-۲ نصب پایگاه داده
۱۱۶	- نصب پایگاه داده غیر فشرده
۱۱۷	- نصب پایگاه داده فشرده

۱۱۹.....	۴-۴ آماده‌سازی نرم‌افزار
۱۲۵.....	فصل ۵: آموزش آنالیز کیفی الگوی پراش اشعه‌ی ایکس توسط نرم‌افزار
۱۲۵.....	۱-۵ مقدمه
۱۲۵.....	۲-۵ مثال‌ها
۱۲۶.....	۱-۲-۵ (۱ مثال) آشنایی با روش اصلاح زمینه در نرم‌افزار X ³ Pert
۱۲۸.....	۲-۲-۵ (۲ مثال) اصلاح زمینه در یک الگوی حاوی فاز آمورف
۱۳۱.....	۳-۲-۵ (۳ مثال) ادغام کردن دو بخش مجزا از یک الگو
۱۳۲.....	۴-۲-۵ (۴ مثال) روش تشخیص و حذف K α_2 از الگوی آزمایشگاهی
۱۳۶.....	۵-۲-۵ (۵ مثال) یک مثال ساده برای فازیابی
۱۳۸.....	۶-۲-۵ (۶ مثال) تأثیر وجود زمینه بر نتیجه‌ی شناسایی فازی
۱۳۹.....	۷-۲-۵ (۷ مثال) مشکل محلول جامد در فازیابی و راه‌حل آن در نرم‌افزار X ³ Pert
۱۴۴.....	۸-۲-۵ (۸ مثال) استراتژی در فازیابی (مقدار فاز دوم)
۱۴۷.....	۹-۲-۵ (۹ مثال) یک الگوی دو فازی
۱۴۹.....	۱۰-۲-۵ (۱۰ مثال) شناسایی یک فاز تنها با یک پیک
۱۵۱.....	۱۱-۲-۵ (۱۱ مثال) آنالیز شیمیایی یکسان، ساختار کریستالی متفاوت
۱۵۵.....	۱۲-۲-۵ (۱۲ مثال) تفاوت در IdeAll و IdeMin
۱۵۷.....	۱۳-۲-۵ (۱۳ مثال) جستجوی سریع با ایجاد محدودیت در ترکیب شیمیایی
۱۶۱.....	۱۴-۲-۵ (۱۴ مثال) استراتژی در فازیابی (تأثیر دما)
۱۶۴.....	۱۵-۲-۵ (۱۵ مثال) آنالیز فازی یک فولاد
۱۶۵.....	۱۶-۲-۵ (۱۶ مثال) شناسایی فازی یک لعاب سرامیکی
۱۶۸.....	۱۷-۲-۵ (۱۷ مثال) آماده شدن برای انجام یک تمرین
۱۶۹.....	۱۸-۲-۵ (۱۸ مثال) تمرین
۱۷۰.....	۱۹-۲-۵ (۱۹ مثال) تأثیر اندازه ذرات در مقیاس نانو بر ظاهر الگوی XRD
۱۷۱.....	۲۰-۲-۵ (۲۰ مثال) تأثیر آماده‌سازی نمونه بر ظاهر الگوی XRD
۱۷۳.....	۲۱-۲-۵ (۲۱ مثال) تأثیر بافت
۱۷۴.....	۲۲-۲-۵ (۲۲ مثال) انتخاب الگوی استاندارد مناسب
۱۷۷.....	۳-۵ چند توصیه
۱۸۱.....	مراجع
۱۸۳.....	پیوست ۱: رسم الگوهای XRD در نرم‌افزار Excel
۱۹۵.....	پیوست ۲: کیفیت الگوهای استاندارد
۱۹۷.....	پیوست ۳: منابع آنلاین
۱۹۹.....	واژه یاب

پیشگفتار

عموماً، آنالیزهای کیفی و کمی دو روی یک سکه هستند، زیرا آنها به ترتیب به دو پرسش "چه چیزی؟" و "چه مقداری؟" پاسخ می‌دهند. در رابطه با آزمون پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) نیز آنالیزهای کیفی و کمی انجام می‌گیرد که هدف از آنالیز کیفی، شناسایی ساختارهای کریستالی (فازها) تشکیل دهنده‌ی نمونه و هدف از آنالیز کمی تعیین درصد هریک از ساختارهای کریستالی است. البته از آنالیز کمی XRD می‌توان اطلاعات بیشتری بدست آورد.

پس از انتشار کتاب "آنالیز کمی پراش اشعه‌ی ایکس به روش ریتولد با استفاده از نرم‌افزار MAUD" و استقبال بسیار خوب محققین از آن، خلا ناشی از نبودن کتاب آنالیز کیفی به خوبی احساس گردید، زیرا معمولاً آنالیز کیفی مقدم بر آنالیز کمی است. بنابراین تلاش منسجمی صورت گرفت تا این کتاب با فاصله‌ی نسبتاً کوتاهی از کتاب آنالیز کمی تهیه گردد.

هرچند کتاب‌های آموزشی و جزوات متعددی در رابطه با نرم‌افزار X'Pert وجود دارد، اما در این کتاب سعی شده است که همانند کتاب آنالیز کمی، رویکرد کتاب صرفاً بر مبنای آموزش نرم‌افزار نباشد. به عبارت دیگر، پس از مطالعه‌ی فصل‌های ابتدایی و آشنایی با مبانی آنالیز کیفی، می‌توان صرف نظر از نوع نرم‌افزار، الگوهای XRD را تحلیل کرد.

از آن‌جا که شناسایی فازی توسط XRD یکی از روش‌های پایه در مشخصه‌یابی مواد است، بنابراین این کتاب می‌تواند مورد استفاده‌ی محققین، دانشجویان و کارشناسان در علوم مختلف قرار گیرد. همچنین، نرم‌افزار X'Pert HighScore Plus محصول شرکت PANalytical - که یکی از سازندگان مطرح دستگاه‌های پراش سنج است - در دنیا بسیار شناخته شده است.

مطالب این کتاب در پنج فصل و سه پیوست ارائه گردیده است. در فصل اول سعی شده است که مروری تاریخی بر رخ داده‌های قبل و بعد از کشف پراش اشعه‌ی ایکس پرداخته شود و یاد افراد موثر در به ثمر رسیدن این روش آزمایشگاهی مهم زنده گردد. در بخش اول از فصل دوم، حداقل اطلاعات مورد نیاز در رابطه با ساختار کریستالی مواد و مفاهیم اولیه‌ی کریستالوگرافی ارائه شده است و در بخش دوم، مبانی آزمون XRD و روش‌های آزمایشگاهی انجام آزمون معرفی گردیده است.

در فصل سوم که اصلی ترین فصل کتاب است، به مبانی آنالیز کیفی XRD و نکات مرتبط با آن پرداخته شده است. در فصل چهارم، روش نصب و آماده سازی نرم افزار X'Pert HighScore Plus آموزش داده شده و در نهایت در فصل پنجم، چگونگی آنالیز کیفی الگوهای XRD توسط نرم افزار X'Pert HighScore Plus در قالب ۲۲ مثال کاربردی به صورت مرحله به مرحله ارایه گردیده است. مثال ها به نحوی انتخاب شده است که تنوع در مواد مختلف رعایت شده و آموزش شامل مراحل مقدماتی تا پیشرفته است. لازم به ذکر است که مطالب ارایه شده در سه فصل اول کتاب عمدتاً از منابع معتبر در رابطه با مبانی روش XRD، استخراج و ترجمه شده است. این منابع در فهرست مراجع به ترتیب از شماره ۱ تا ۱۲ قرار دارند و خوانندگان عزیز می توانند برای اطلاعات بیشتر به آنها مراجعه کنند. خصوصاً مرجع شماره ۱۱ بسیار مفید، کاربردی و به روز است.

در اینجا ابتدا از خداوند بزرگ سپاسگزارم که توفیق نگارش کتاب دوم در رابطه با پراش اشعه ایکس را به اینجانب عطا فرمود. از خانم اعظم فاطمی، فارغ التحصیل کارشناسی ارشد فیزیک دانشگاه اصفهان که در نگارش این کتاب به بنده کمک کردند، تشکر می کنم. همچنین از سرکار خانم مرضیه اکبری، کارشناس با تجربه ی بخش اشعه ی ایکس آزمایشگاه مرکزی دانشگاه اصفهان که زحمت بازمینی علمی و فنی کتاب را بر عهده داشتند، قدردانی می نمایم. از تمامی پژوهش گرانی که با اختیار قرار دادن اطلاعات فایل های آزمایشگاهی خود در قالب برخی از مثال ها همکاری داشته اند، تشکر می کنم. همچنین از جناب آقای دکتر رکنی زاده معاون پژوهش و فناوری دانشگاه اصفهان، جناب آقای دکتر همتی رئیس اداره انتشارات دانشگاه اصفهان، اعضای شورای انتشارات دانشگاه اصفهان و جناب آقای نیکبخت کارشناس اداره انتشارات دانشگاه اصفهان و دیگر افرادی که در فراهم شدن شرایط برای چاپ این کتاب نقش داشته اند، قدردانی می گردد.

از طریق سایت www.xr dini.com می توانید نظرات، پیشنهادات، انتقادات و سوالات خود را مطرح نمایید. امید است که مطالب ارایه شده در این کتاب مورد استفاده ی تمامی پژوهشگرانی که در جهت شکوفایی و سربلندی کشور عزیزمان تلاش می کنند، قرار گیرد.

قاسم دینی

دانشگاه اصفهان، دانشکده علوم و فناوری های نوین

بهار ۱۳۹۷