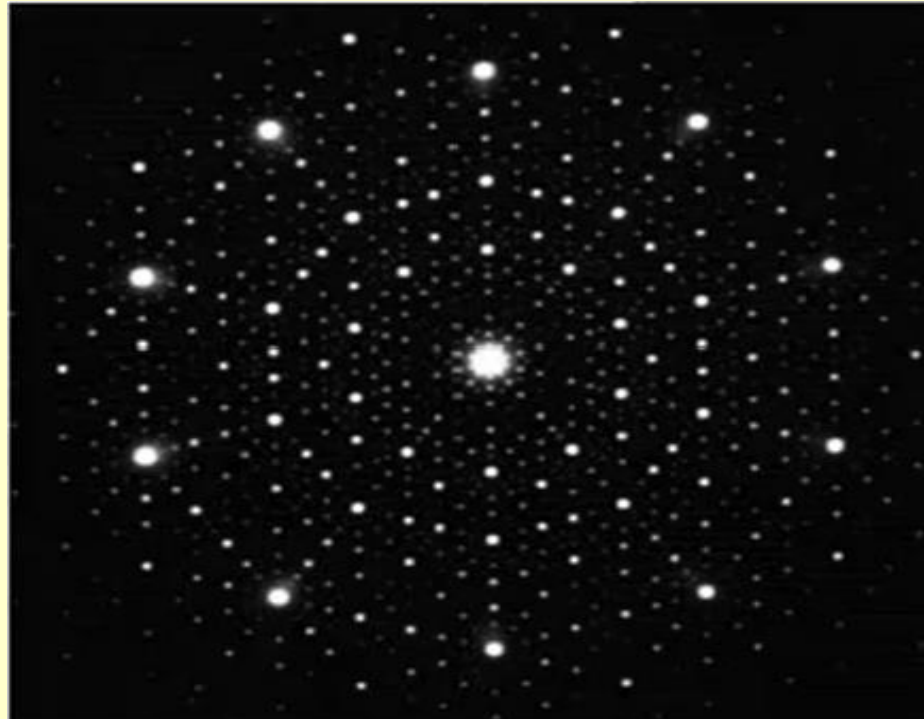


علم مواد

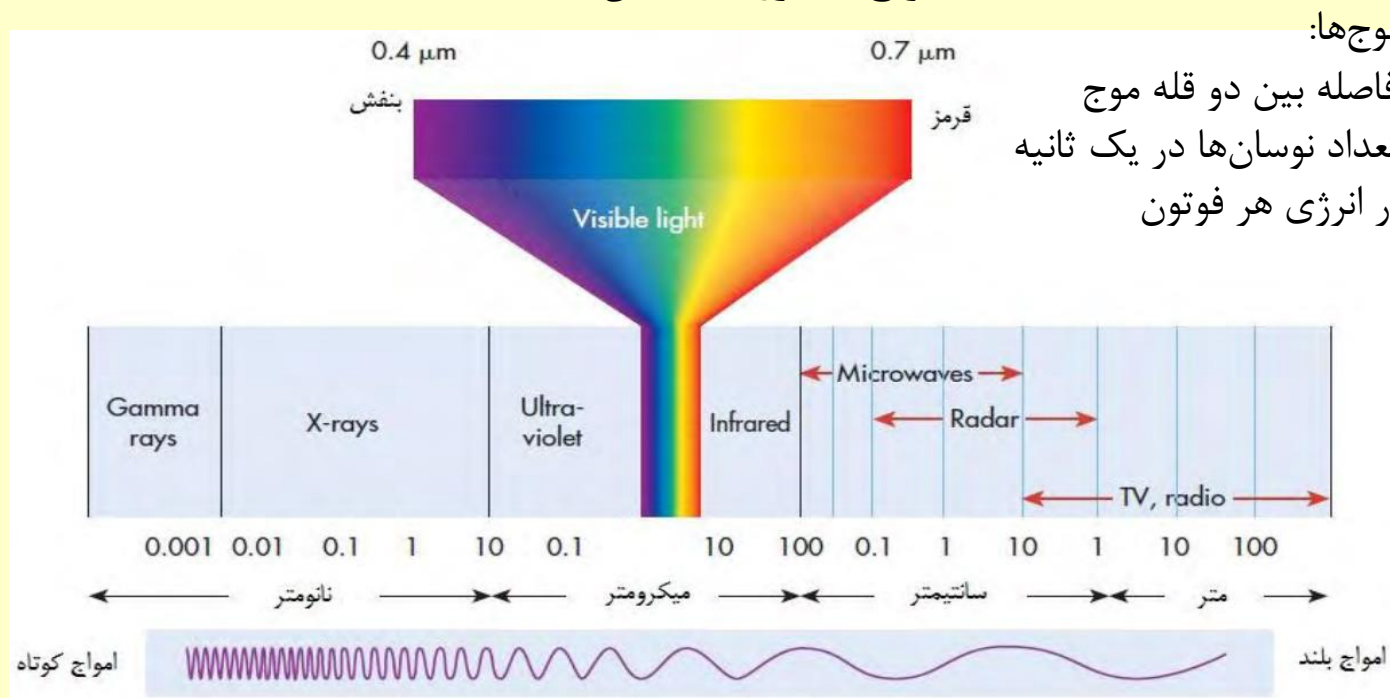
بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

Crystal structure analysis using X-rays



بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

امواج الکترومغناطیس



سه کمیت بنیادی موج‌ها:

- طول موج (λ): فاصله بین دو قله موج
- فرکانس (f): تعداد نوسان‌ها در یک ثانیه
- انرژی (E): مقدار انرژی هر فوتون

رابطه بین سه کمیت:

$$c = \lambda f$$

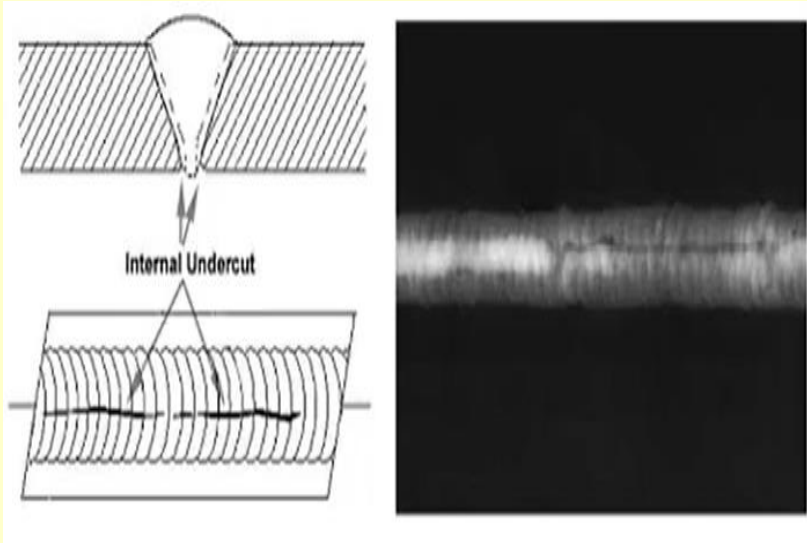
$$E = hf$$

نتیجه مهم:

هرچه طول موج کوتاه‌تر ← فرکانس بیشتر ← انرژی بالاتر
به همین دلیل اشعه ایکس انرژی بالایی دارد و می‌تواند با ساختار اتمی
برهم‌کنش کند.

بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

کاربردهای اشعه ایکس



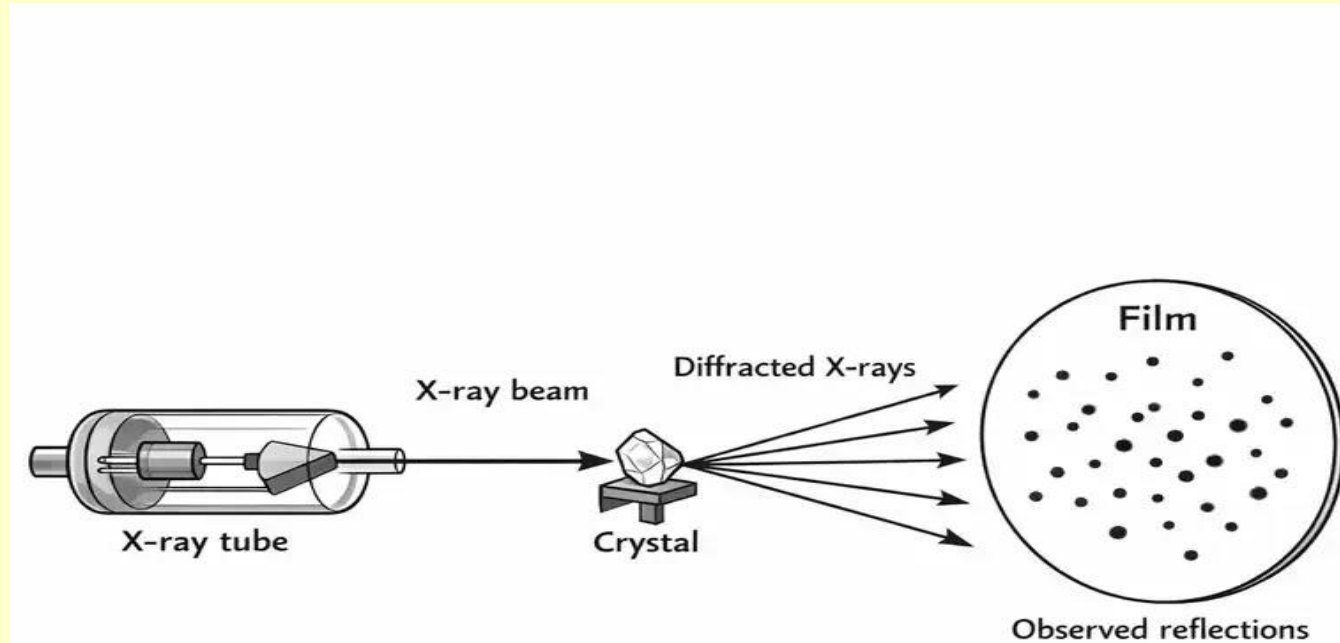
آشکارسازی عیوب داخلی جوش با اشعه ایکس



اولین تصویر ثبت شده از اشعه ایکس

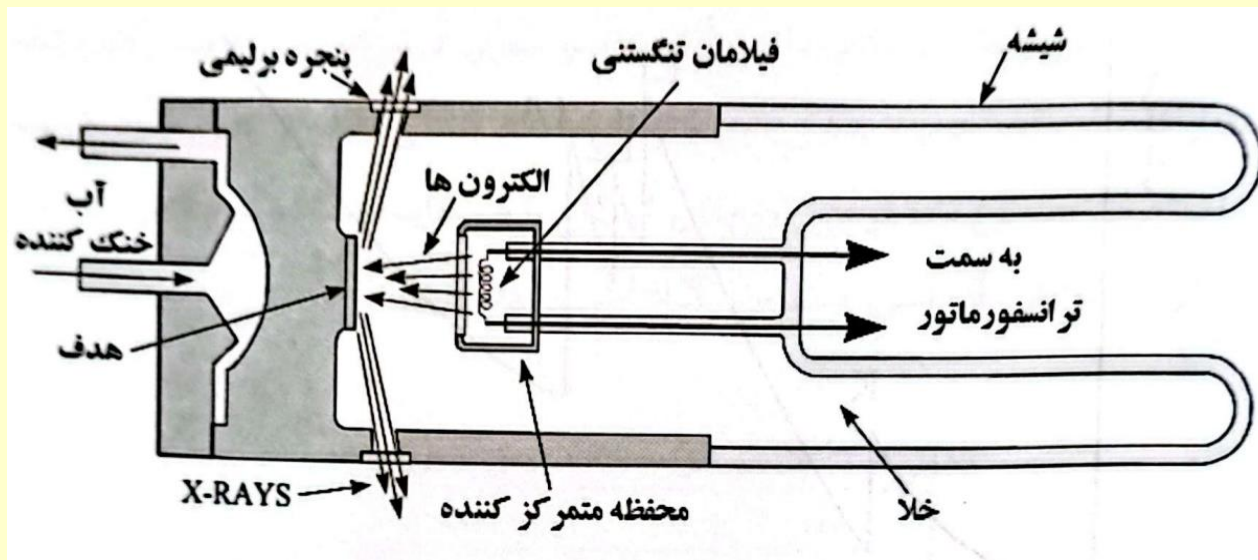
بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

اشعه ایکس در بلورشناسی



بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

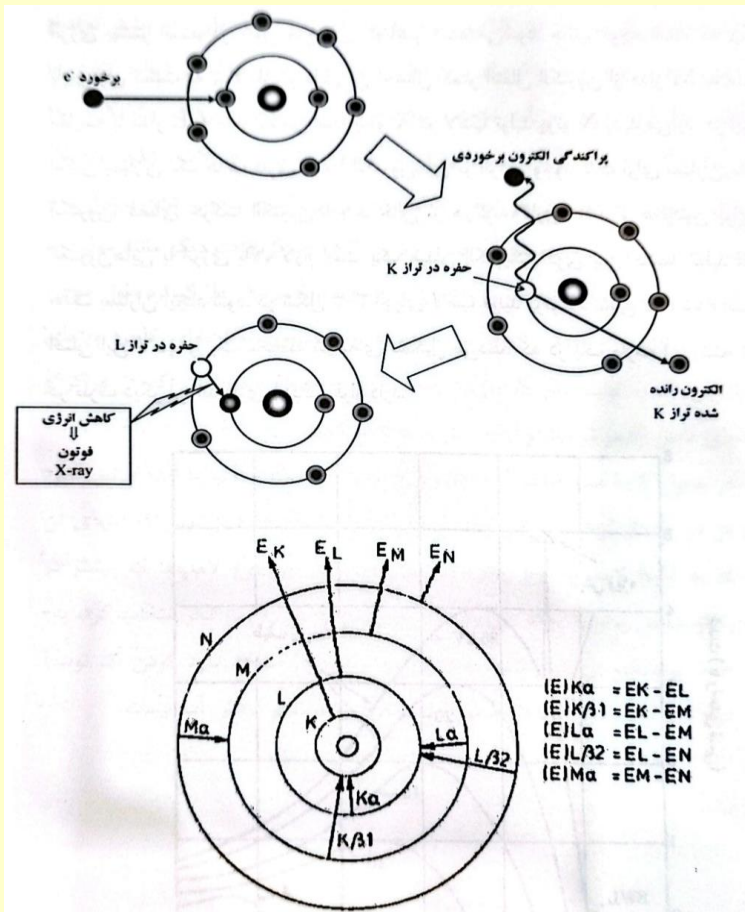
عملکرد لامپ اشعه ایکس (X-ray Tube)



- گرم شدن فیلامان تنگستن ← آزاد شدن الکترون ها (نشر گرمایی)
- اعمال ولتاژ بالا (KV) ← شتاب گرفتن الکترون ها به سمت تارگت
- برخورد الکترون های پرانرژی با تارگت ← تولید اشعه ایکس
- خروج پرتو ایکس ← هدایت به سمت نمونه
- جنس تارگت متفاوت است و معمولاً از فلزاتی مانند مس، کبالت، مولیبدن و کروم ساخته می شود.

بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

تولید اشعه ایکس



برخورد الکترون‌های پراانرژی با اتم تارگت:

- کنده شدن یک الکترون از تراز داخلی K
- ایجاد حفره در لایه K
- انتقال الکترون از لایه بالاتر (L, M) برای پر کردن حفره
- آزاد شدن اختلاف انرژی به صورت فوتون اشعه ایکس
- $K\alpha$: انتقال الکترون از $L \rightarrow K$
- $K\beta$: انتقال الکترون از $M \rightarrow K$

بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

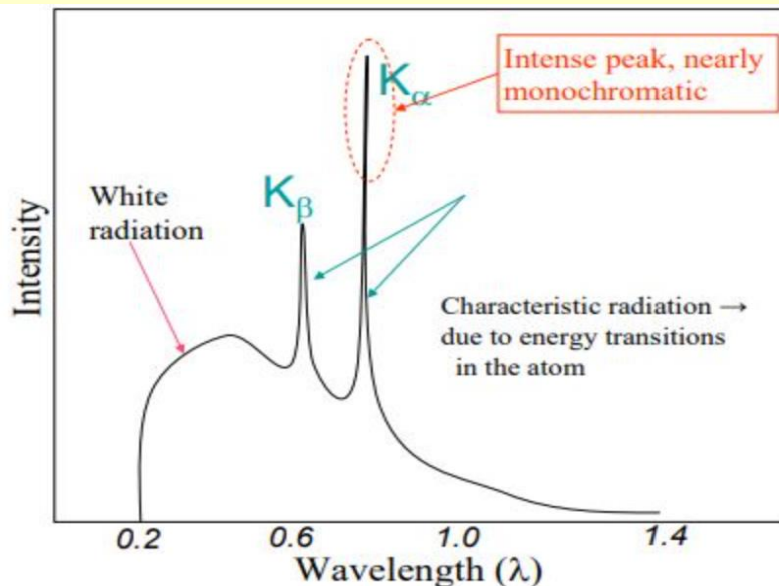
لامپ اشعه ایکس (X-ray Tube)



بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

ویژگی‌های طیف اشعه ایکس

- موقعیت و شدت خطوط برای هر عنصر تارگت متفاوت است.
- $K\beta$ حذف می‌شود چون شدت کم دارد و پیک‌های مزاحم ایجاد می‌کند.
- $K\alpha$ قوی‌تر و پایدارتر است و معمولاً تنها خط مورد استفاده در XRD است.
- فیلتر مناسب انتخاب می‌شود تا $K\beta$ و بخش‌هایی از بک‌گراند حذف شوند.

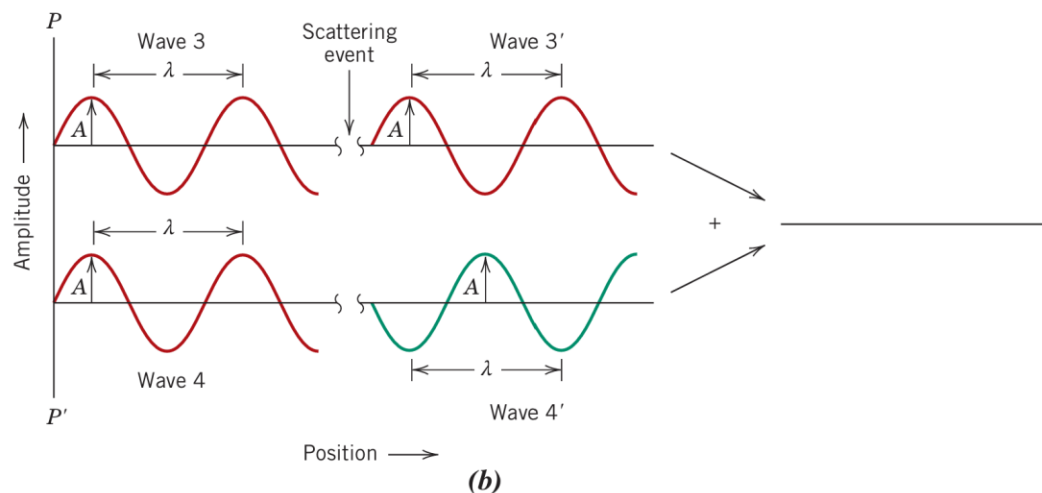
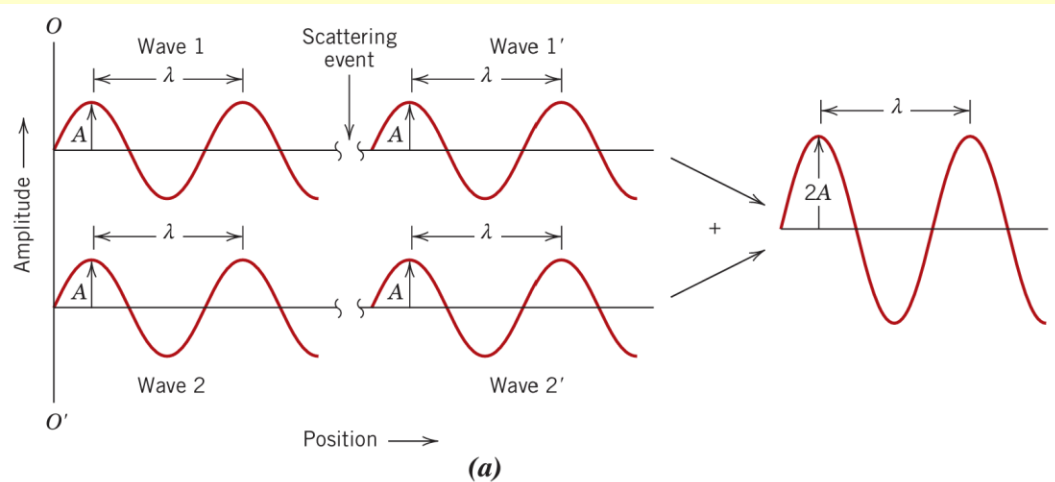


X-ray sources with different λ for doing XRD studies

Target Metal	λ Of $K\alpha$ radiation (Å)
Mo	0.71
Cu	1.54
Co	1.79
Fe	1.94
Cr	2.29

بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

تداخل سازنده و ویرانگر در پراش اشعه ایکس



پس از برخورد اشعه ایکس با جامد بلوری
حالت **a** و **b** ممکن است پیش آید:

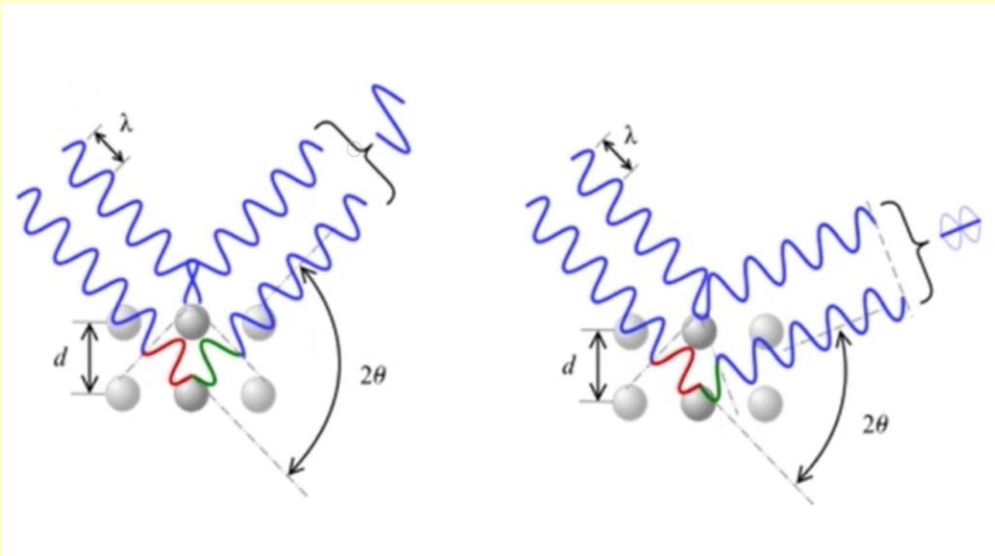
- اگر امواج هم‌فاز باشند $\leftarrow$ (a) تداخل سازنده رخ می‌دهد و شدت موج افزایش می‌یابد (تشکیل پیک پراش).
- اگر امواج ناهم‌فاز باشند $\leftarrow$ (b) تداخل ویرانگر رخ می‌دهد و شدت موج کاهش یافته یا حذف می‌شود.

- پراش پرتو ایکس (X-ray diffraction) پدیده‌ای است که در آن پرتوهای ایکس پراکنده شده توسط اتم‌ها در یک ساختار بلورین، در جهت‌های خاص فضایی یکدیگر را تقویت کرده و پرتو قوی‌تر را پدید آورند. حالت (a)

بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

تداخل سازنده و ویرانگر در پراش اشعه ایکس

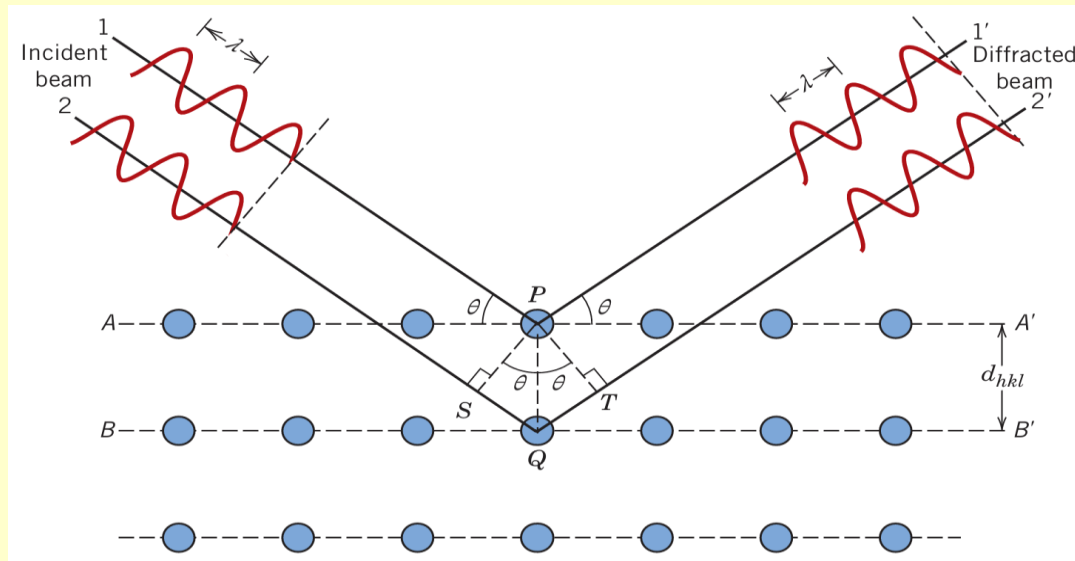
برخورد اشعه ایکس با جامد بلوری :



- اگر امواج هم فاز باشند ← تداخل سازنده رخ می دهد و شدت موج افزایش می یابد (تشکیل پیک پراش).
- اگر امواج ناهم فاز باشند ← تداخل ویرانگر رخ می دهد و شدت موج کاهش یافته یا حذف می شود.

بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

شرط تداخل سازنده و قانون براگ در یک صفحه‌ی بلوری



• دو موج فرودی ۱ و ۲ به دو صفحه بلوری برخورد می‌کنند.

• فاصله بین صفحات برابر d است.

• به سبب فاصله (d) میان صفحات، موج ۲ نسبت به موج ۱ مسیر طولانی‌تری طی می‌کند.

• این اختلاف مسیر تعیین‌کننده نوع تداخل است.

• پس از پراکندگی، موج‌ها به صورت ۱' و ۲' خارج می‌شوند.

• اگر اختلاف مسیر موج ۲ برابر مضرب صحیحی از طول موج ($n\lambda$) باشد:

موج‌ها هم‌فاز می‌شوند و پراش اتفاق رخ می‌دهد.

تداخل سازنده رخ می‌دهد.

نتیجه: ایجاد پیک XRD

فاصله‌ی بین صفحه‌ای در شبکه‌های مکعبی:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

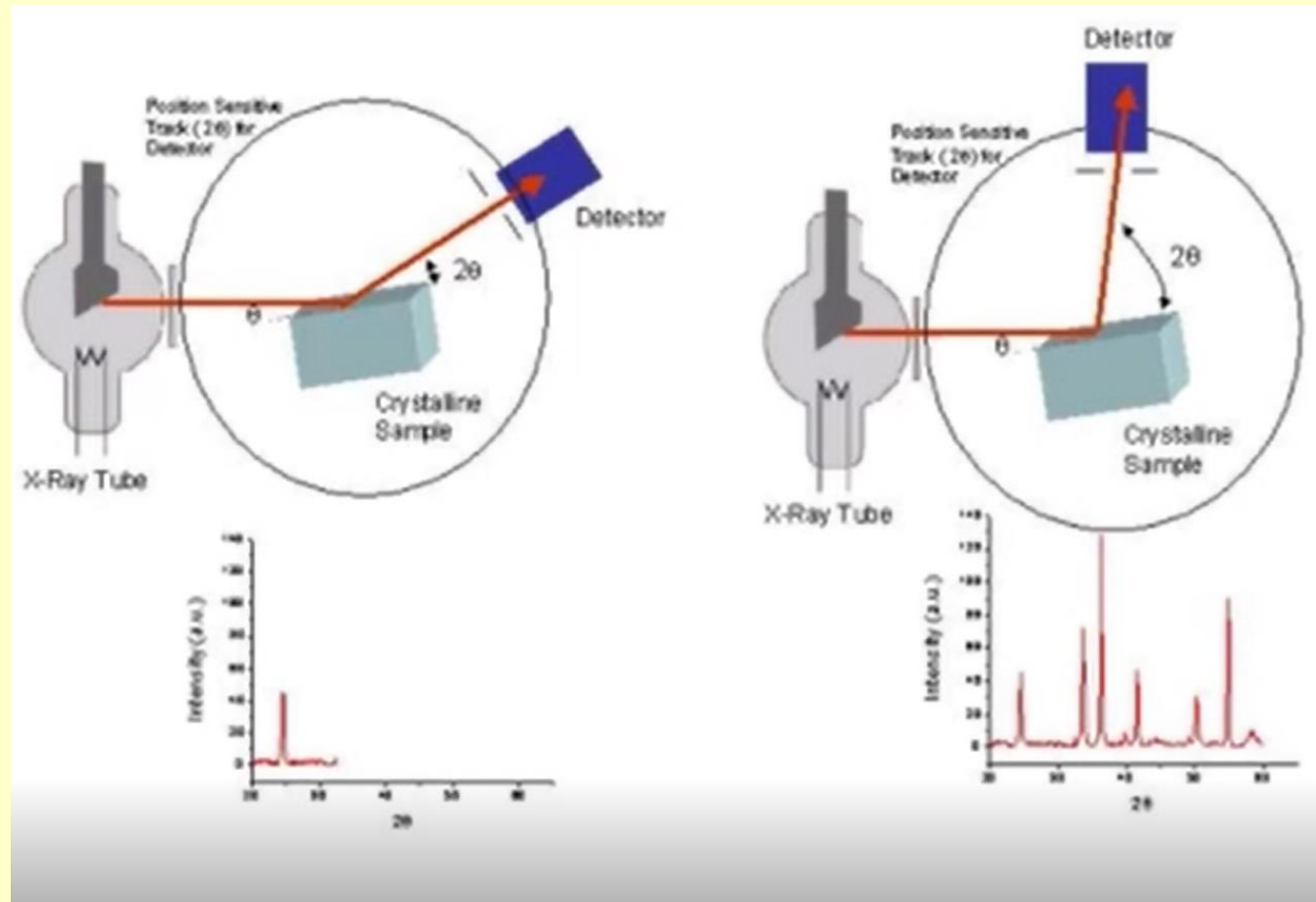
شرط تداخل سازنده (قانون براگ):

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$$

قانون
براگ $n\lambda = 2d \sin \theta$

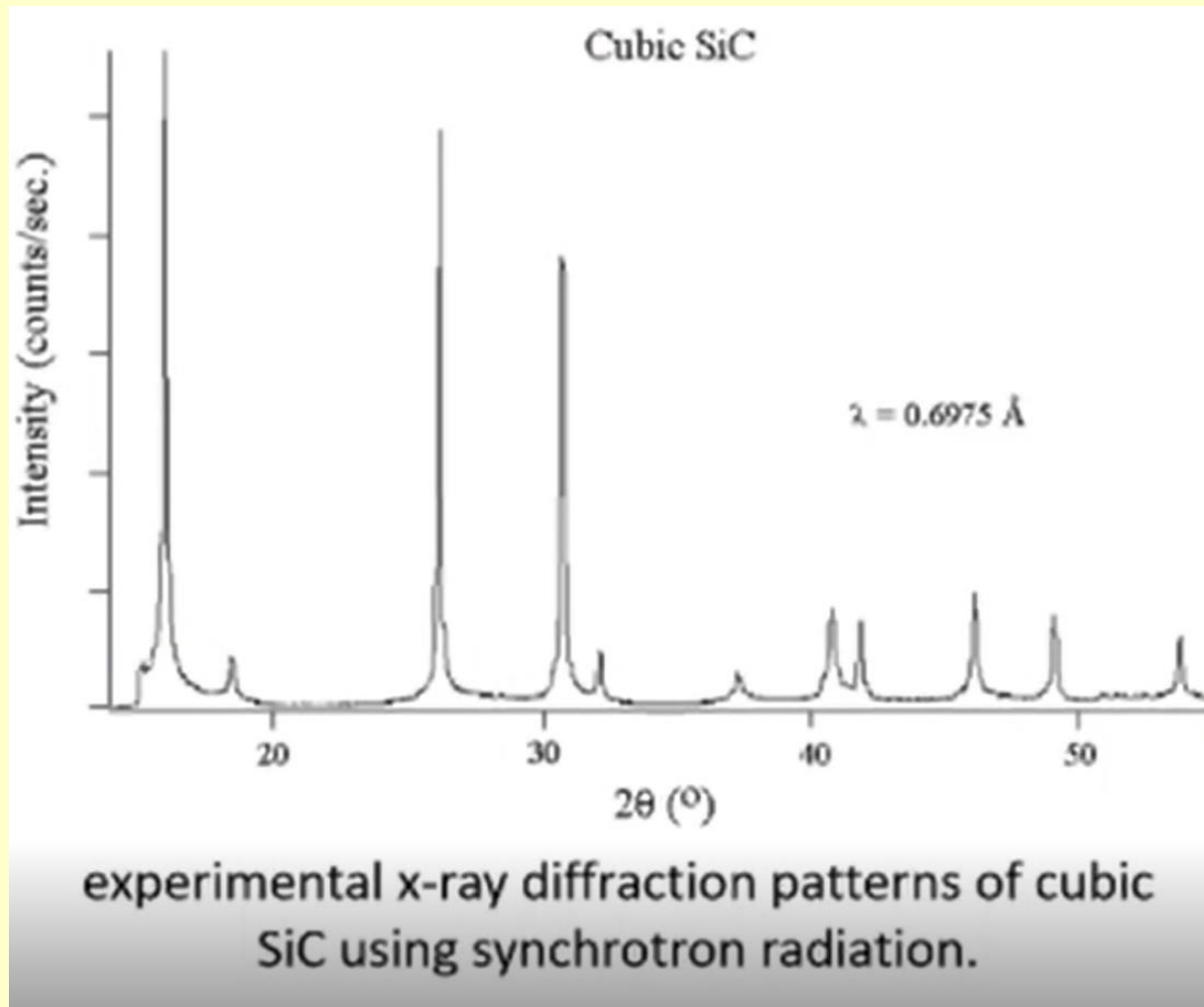
بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

پیک‌های اشعه ایکس



بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

پیک‌های اشعه ایکس



بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

مثال:

برای آهن با ساختار مکعبی مرکزپر، موارد زیر را محاسبه کنید:

الف) فاصله بین صفحه‌ای

ب) زاویه پراش

برای مجموعه صفحات (۲۲۰).

پارامتر شبکه آهن برابر 0.2866 نانومتر است. فرض کنید از پرتو ایکس تک‌رنگ با طول موج 0.1790 نانومتر استفاده می‌شود و مرتبه بازتاب برابر ۱ است.

بررسی ساختارهای بلوری با استفاده از اشعه ایکس

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$
$$= \frac{0.2866 \text{ nm}}{\sqrt{(2)^2 + (2)^2 + (0)^2}} = 0.1013 \text{ nm}$$

راه حل:

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{(1)(0.1790 \text{ nm})}{(2)(0.1013 \text{ nm})} = 0.884$$

$$\theta = \sin^{-1}(0.884) = 62.13^\circ$$

The diffraction angle is 2θ , or

$$2\theta = (2)(62.13^\circ) = 124.26^\circ$$

نکته: در دستگاه XRD زاویه بین پرتو ورودی و پرتو پراش یافته اندازه گیری می شود، به همین دلیل مقدار 2θ گزارش می شود.