

آشنایی با آنالیز فازی نانومواد با استفاده از نرم افزار X'Pert HighScore

مؤلفین:

صاحبعلی منافعی، سید حسین بدیعی، مجتبی جعفریان



دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود

سرشناسه: منافی، صاحبعلی، ۱۳۵۷

عنوان و نام پدیدآور: آشنایی با آنالیز فازی نانومواد با استفاده از نرم افزار X'Pert

HighScore/ مولفین: صاحبعلی منافی، سیدحسین بدیعی، مجتبی جعفریان.

مشخصات نشر: تهران: دانشگاه آزاد اسلامی، سازمان چاپ و انتشارات، ۱۳۹۱.

مشخصات ظاهری: ۱۹۷ ص.: مصور (رنگی)، جدول.

شابک: 978-964-10-1505-5

وضعیت فهرست نویسی: فیا

موضوع: مواد نانوساختار-- تجزیه و آزمایش-- برنامه های کامپیوتری

موضوع: مواد نانوساختار-- تجزیه و آزمایش

شناسه افزوده: بدیعی، سیدحسین، ۱۳۳۹-

شناسه افزوده: جعفریان، مجتبی، ۱۳۶۷-

شناسه افزوده: دانشگاه آزاد اسلامی، سازمان چاپ و انتشارات

رده بندی کنگره: ۱۳۹۱ م ۴۱۸/۶/ن ۲۸

رده بندی دیویی: ۶۲۰/۵

شماره کتابشناسی ملی: ۲۷۳۵۳۱۲

تاریخ درخواست: ۱۳۹۱/۰۱/۲۱

کد پیگیری: ۲۷۳۴۶۵۹

عنوان کتاب: آشنایی با آنالیز فازی نانومواد با استفاده از نرم افزار X'Pert HighScore

تألیف: صاحبعلی منافی، سیدحسین بدیعی، مجتبی جعفریان

چاپ اول: ۱۳۹۱

تیراژ: ۲۰۰۰ نسخه

ناشر: دانشگاه آزاد اسلامی - سازمان چاپ و انتشارات با همکاری واحد شاهرود

طراحی جلد: مجتبی جعفریان.

قیمت: ۶۵۰۰۰ ریال

شابک: ۹۷۸-۹۶۴-۱۰-۱۵۰۵-۵

بسم الله الرحمن الرحيم

پیشگفتار مولفین

واژه Characterization هنگامی که در علم مواد مورد استفاده قرار گیرد، به معنای استفاده از تکنیک‌های خارجی جهت کاوش در ساختمان داخلی و خواص ماده است. تکنیک‌های تحلیلی مورد استفاده در شناسایی مواد برای رسیدن به تصویر بزرگ شده‌ای از نمونه است. این تصویر بدست آمده از ساختار داخلی موجب رسیدن ما به اطلاعات مهمی از جمله: توپوگرافی، توزیع و فراوانی عناصر موجود در نمونه و فعل و انفعالات این عناصر (فازهای تشکیل دهنده ماده) می‌گردد. در مطالعه هر مطلبی طبقه‌بندی کردن یکی از بهترین راه‌ها در جهت درک و یادگیری بهتر مطلب است. در زمینه شناسایی و آنالیز مواد نیز طبقه‌بندی‌های مختلفی وجود دارد که بنابر هدف نویسنده از ارائه مطلب، نحوه دسته‌بندی مطلب نیز متفاوت است. مثلاً در برخی از کتاب‌ها طبقه‌بندی را براساس ماهیت شناسایی انجام می‌دهند. براساس این تقسیم‌بندی که حالتی کلی از بیان روش‌های شناسایی و آنالیز مواد را دارد، روش‌های شناسایی به صورت زیر تقسیم‌بندی می‌شوند:

الف) آنالیز عنصری (آنالیز شیمیایی)

ب) آنالیز فازی (آنالیز معدنی)

ج) آنالیز ریزساختاری (آنالیز میکروسکوپی)

در کنار این تقسیم‌بندی دو گروه دیگر نیز اضافه می‌شوند، یکی از این گروه‌ها آنالیز سطح است که حالت عنصری دارد. از این لحاظ در تقسیم‌بندی پنجگانه زیر در کنار آنالیز عنصری نشان داده شده است. گروه دیگر، آنالیز حرارتی است که حالت تکمیل‌کننده را دارد. لازم به ذکر است که پنج گروه از روش‌های شناسایی و آنالیز مواد که در زیر نشان داده شده است، اصلی‌ترین روش‌های آنالیز و شناسایی را که در علم

مواد مورد نیاز است، در بر می گیرد. به عبارت دیگر، با این مجموعه می توان اطلاعات کاملی در مورد مواد فلزی، سرامیکی، معدنی و آلی بدست آورد. البته بیان یک نکته بسیار مهم است که روش های دیگری نیز وجود دارند که استفاده از آنها در موارد مختلف مرسوم است.

(۱) آنالیز سطح

(۲) آنالیز عنصری

(۳) آنالیز فازی

(۴) آنالیز ریزساختاری

(۵) آنالیز حرارتی

در کتاب حاضر به بررسی و تحلیل آنالیز فازی بوسیله نرم افزار X'Pert HighScore پرداخته شده است. این نرم افزار راهی ساده برای شناسایی فازهای موجود در ترکیبات سنتز شده به طرق مختلف در اختیار پژوهشگران قرار می دهد. آشنایی با این نرم افزار نه تنها برای شناسایی فازها بلکه به دلیل قابلیت های بسیار دیگری که دارا می باشد و در فصول این کتاب مفصلاً شرح داده شده است برای تمامی دانشجویان مقاطع کارشناسی ارشد و دکتری در رشته های مواد، شیمی و فیزیک پیشنهاد می شود. امید است این کتاب کمک شایانی به هرچه بهتر پیشبردن مقاصد پژوهشگران در امر تحقیق و پژوهش نماید.

مقدمه

نرم افزار X'Pert HighScore یک نرم افزار تخصصی جهت شناسایی فازهای موجود در الگوهای پراش اشعه ایکس می باشد، که با امکانات و ابزارهای منحصر به فرد، فرآیند شناسایی فاز را ساده تر از گذشته و نیز کاربردی تر کرده است. در گذشته شناسایی فاز به صورت دستی، با امکانات محدود و استفاده از کارت های استاندارد پراش سنجی به صورت کاملاً تقریبی صورت می گرفت. نرم افزار X'Pert HighScore از جمله نرم افزارهایی است که به منظور شناسایی فاز مورد استفاده قرار می گیرد. از جمله امکانات این نرم افزار می توان به شناسایی فازهای موجود در نمونه مجهول، مقایسه الگوهای پراش ترکیبات مختلف با یکدیگر، بررسی ساختمان کریستالی، پارامتر شبکه و خصوصیات فیزیکی فازهای مختلف موجود در نمونه مجهول، مقایسه الگوهای پراش نمونه های مجهول با یکدیگر، محاسبه متوسط اندازه دانه در نمونه مجهول با استفاده از رابطه شرر، امکان گرفتن خروجی Word پس از اتمام عملیات شناسایی و سایر امکانات کاربردی که در فصل های آینده به بررسی آنها پرداخته شده است، اشاره کرد.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
بخش اول: نرم افزار X'Pert HighScore	۱۳
فصل اول: نصب و اجرای نرم افزار X'Pert HighScore	۱۴
فصل دوم: دستورات مقدماتی	۲۳
۱-۲- دستور New	۲۳
۲-۲- دستور Open	۲۴
۳-۲- دستور Save Document	۲۵
۴-۲- دستور Save As	۲۷
۲-۵- دستور Exit	۲۸
فصل سوم: آشنایی با محیط نرم افزار	۳۰
۱-۳- نوار منو (Menu bar)	۳۱
۲-۳- نوار ابزار نمایش (Display Toolbar)	۳۱
۳-۳- نوار ابزار استاندارد (Standard Toolbar)	۳۱
۴-۳- نوار ابزار هدایتگر (Navigation Toolbar)	۳۱
۵-۳- پالت ابزار (Tool Palette)	۳۱
۶-۳- نوار ابزار ترکیبات کاربر (User Batches Toolbar)	۳۲
۷-۳- نوار ابزار الگو (Pattern Toolbar)	۳۲
منوهای برنامه	۳۲
۸-۳- منوی File	۳۲
۹-۳- منوی Edit	۳۲
۱۰-۳- منوی View	۳۳
۱۱-۳- منوی Treatment	۳۴
۱۲-۳- منوی Reference Patterns	۳۴

۳۵	 Analysis منوی ۱۳-۳
۳۵	 Reports منوی ۱۴-۳
۳۶	 Tools منوی ۱۵-۳
۳۶	 Customize منوی ۱۶-۳
۳۷	 Window منوی ۱۷-۳
۳۸	 Help منوی ۱۸-۳
۳۹	 فصل چهارم: آشنایی با عملکرد دستورات مختلف
۳۹	 ۱- بررسی عملکرد دستورات مهم در منوی File
۳۹	 Insert -۱-۱
۴۰	 Print... -۲-۱
۴۱	 Graphic Page Setup... -۱-۲-۱
۴۱	 Print Graphics ... -۲-۲-۱
۴۲	 Print Preview -۳-۲-۱
۴۲	 Graphic Print Setup -۴-۲-۱
۴۲	 Properties -۳-۱
۴۳	 ۲- بررسی عملکرد دستورات مهم در منوی View
۴۳	 Lock Pane Positions -۱-۲
۴۳	 Panes Default Setting -۲-۲
۴۴	 Set Manual Ranges... -۳-۲
۴۴	 Maximize Main Graphics On/Off -۴-۲
۴۵	 ۳- بررسی عملکرد دستورات مهم در منوی Treatment
۴۵	 Determine Background... -۱-۳
۴۶	 Search Peaks -۲-۳
۵۰	 Strip K-Alpha2... -۳-۳

۵۰	 Smooth... -۴-۳
۵۲	Clip Range -۵-۳
۵۵	Reference Patterns بررسی عملکرد دستورات مهم در منوی -۴
۵۵	Retrieve Pattern by -۱-۴
۵۵	Reference Code... -۱-۱-۴
۵۸	Text Search -۲-۱-۴
۵۹	Restrictions -۳-۱-۴
۵۹	Subfiles -۱-۳-۱-۴
۶۲	Chemistry -۲-۳-۱-۴
۶۳	Quality -۳-۳-۱-۴
۶۴	Save Pattern List as Subset... -۲-۴
۶۴	Load Subset to Pattern List ... -۳-۴
۶۴	Remove All Patterns -۴-۴
۶۵	Analysis بررسی عملکرد دستورات مهم در منوی -۵
۶۵	Search- Match... -۱-۵
۷۱	Allow pattern shift -۲-۵
۷۲	Reports بررسی عملکرد دستورات مهم در منوی -۶
۷۲	Report/List Print Setup... -۱-۶
۷۲	Report Page Setup... -۲-۶
۷۲	Create RTF Report -۳-۶
۷۳	Create Word Report -۴-۶
۷۳	Edit Report Definition... -۵-۶
۷۳	Tools بررسی عملکرد دستورات مهم در منوی -۷
۷۳	Spectral Lines -۱-۷

۷۴	 Label Peaks... -۲-۷
۷۶	 Bragg Calculator... -۳-۷
۷۷	 Alpha/Beta Calculator... -۴-۷
۷۷	 MAC Calculator... -۵-۷
۷۹	 Scherrer Calculator... -۶-۷
۸۱	 بخش دوم: آشنایی با پراش اشعه ایکس
۸۲	 فصل پنجم
۸۲	 ۱-۵- اشعه ایکس
۸۲	 ۲-۵- تاریخچه
۸۳	 ۳-۵- انواع پرتو ایکس
۸۳	 ۴-۵- پراش اشعه ایکس
۸۵	 ۵-۵- قانون براگ
۸۷	 ۶-۵- اجزای دستگاه پراش پرتو ایکس
۸۹	 ۷-۵- مشخصات فنی دستگاه پراش پرتو ایکس
۹۱	 بخش سوم: شروع کار با انجام عملیات شناسایی فازی
۹۲	 فصل ششم
۹۲	 ۱-۶- وارد نمودن الگوی پراش و تغییر حالت نمایشی محور λ
۹۵	 ۲-۶- جستجوی پیک‌ها
۹۸	 ۳-۶- فراخوانی الگوهای مرجع
۱۰۰	 ۴-۶- مقایسه الگوهای پراش مرجع با الگوی پراش نمونه مجهول
۱۰۴	 ۵-۶- وارد نمودن الگوی پراش در نرم‌افزار اکسل
۱۱۶	 بخش چهارم: آشنایی با روش‌های محاسبه متوسط اندازه دانه
۱۱۷	 فصل هفتم
۱۱۷	 ۱-۷- تغییرات پیک‌های پراش

۱۲۰	۲-۷- آشنایی با روش شرر.....
۱۲۲	۳-۷- روش ویلیامسون- هال.....
۱۲۶	۴-۷- روش وارن- اورباخ (Warren-Averbach).....
۱۲۸	۵-۷- اصلاح روابط ویلیامسون- هال و وارن- اورباخ.....
۱۳۲	۶-۷- روش ویلیامسون- هال اصلاح شده.....
۱۳۳	۷-۷- استفاده از تابع شدت پیک.....
۱۳۵	۸-۷- استفاده از تابع تبدیل فوری شدت پیک.....
۱۳۶	۹-۷- روش وارن- اورباخ اصلاح شده.....
۱۳۷	۱۰-۷- دستیابی به روش مناسب جهت حذف خطای دستگاهی.....
۱۴۱	بخش پنجم: آشنایی با روش لایون- ریلی و محاسبات مربوط به برخی ترکیبات.....
۱۴۲	فصل هشتم.....
۱۴۲	۱-۸- تعیین ثابت شبکه با استفاده از روش XRD.....
۱۴۳	۲-۸- رابطه کلی بین صفحات کریستالی و.....
۱۴۴	۳-۸- تعیین پارامتر شبکه با رابطه Nelson-Riely.....
۱۴۷	۴-۸- تعیین پارامتر شبکه با رابطه Nelson-Riely.....
۱۵۱	بخش ششم: آشنایی با میکروسکوپ‌های الکترونی.....
۱۵۲	فصل نهم.....
۱۵۲	۱-۹- میکروسکوپ‌های الکترونی.....
۱۵۴	۲-۹- چگونگی عملکرد دستگاه SEM.....
۱۵۷	۳-۹- بخش یک سیگنال در میکروسکوپ الکترونی روبشی.....
۱۶۰	۴-۹- آشکار کردن الکترون‌های ثانویه.....
۱۶۲	۵-۹- آشکار کردن الکترون‌های برگشتی.....
۱۶۳	۶-۹- اپتیک در میکروسکوپ الکترونی روبشی.....
۱۶۴	۷-۹- اجزای میکروسکوپ الکترونی روبشی.....

- ۱۶۴..... ۹-۷-۱- نقاط تصویر
- ۱۶۵..... ۹-۷-۲- عمق میدان
- ۱۶۶..... ۹-۸-۱- دقت نهایی میکروسکوپ الکترونی روبشی
- ۱۶۸..... ۹-۸-۱- مینیمم اندازه قابل حصول probe
- ۱۶۹..... ۹-۸-۲- مینیمم جریان قابل استفاده در پرتو
- ۱۷۲..... ۹-۹-۱- اجرای کار میکروسکوپ الکترونی روبشی
- ۱۷۳..... ۹-۱۰-۱- توپوگرافی تصویر
- ۱۷۸..... ۹-۱۱-۱- میکروسکپ الکترونی عبوری (TEM)
- ۱۸۲..... ۹-۱۲-۱- میکروسکپی براد بویشی (SPM)
- ۱۸۹..... ۹-۱۳-۱- میکروسکوپ تونل زنی بویشی (STM)
- ۱۹۴..... ۹-۱۴-۱- مراجع