Iranian Journal of Crystallography and Mineralogy,Vol.3, No.1, Spring 1995

Computer Analysis of XRF and XRD Data

Baradaran Dilmaghani, S. - Balazadeh Bahar, H. - Partoi, N.

University of Tabriz, Tabriz - IRAN

Abstract : Modern X-ray systems used in research are equipped with computers. To modernize the available systems which are not attached to such computers and in order to have a rapid access to the data extracted from the system, furnishing such systems seems necessary. In this paper a research conducted at the university of Tabriz to arrive at the above mentioned aims and to have an access to the results obtained from the X-ray systems, the process of computer analysis of XRF and XRD data are presented.

[Downloaded from ijcm.ir on 2025-07-03]

مجلهٔ بلورشناسی و کانی‌شناسی ایران، سال سوم، شمارهٔ اول ، بهار ۱۳۷۴ از صفحهٔ ۱۵ تا ۲۲

پژوهشی

تحلیل کامپیوتری داده‌های پراش سنجی و طیف سنجی پرتو X

سعید برادران دیلمقانی
گروه فیزیک ـ دانشگاه تبریز

حسین بالازاده بهار ـ ناصر پرتوی
دانشکدهٔ فنی ـ دانشگاه تبریز

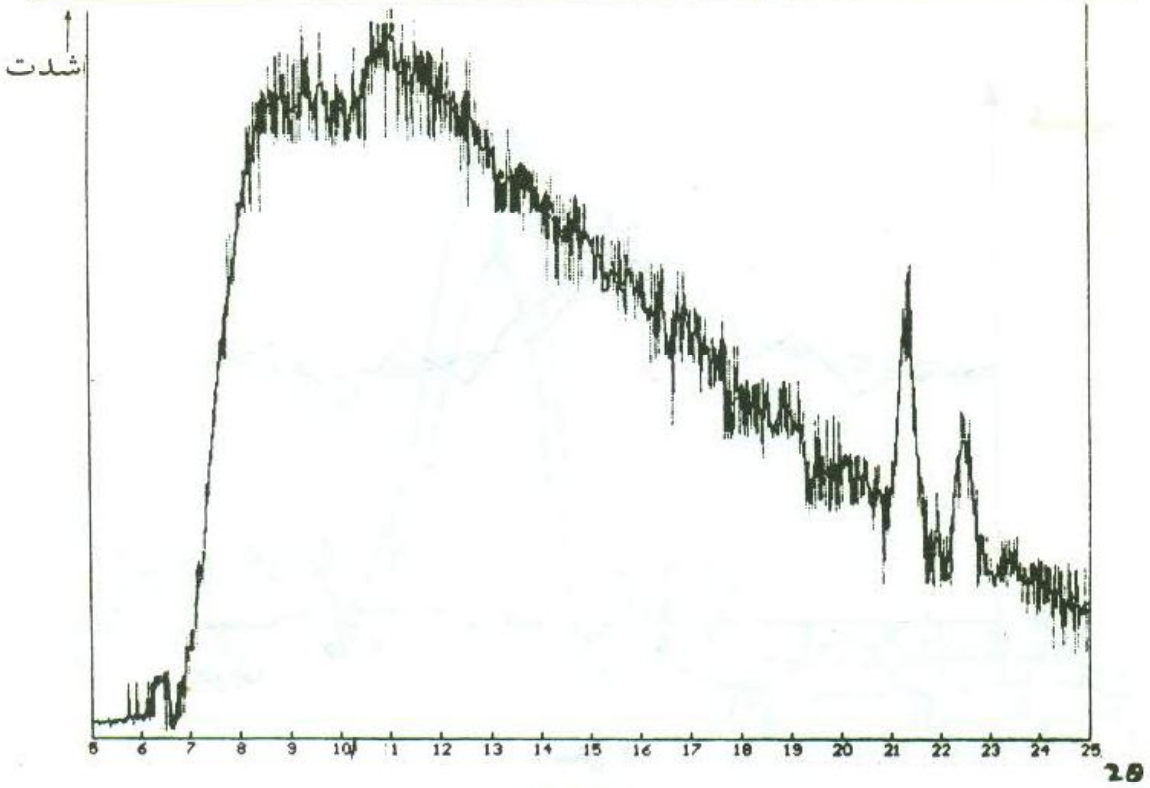
چکیده : دستگاههای پرتو X امروزی که در تحقیقات و مطالعات پژوهشی بکار می‌روند، مجهز به کامپیوتر هستند. برای مدرنیزه‌کردن دستگاهای موجود که مجهز به چنین کامپیوترهایی نیستند و نیز جهت دستیابی سریع به داده‌های بدست آمده از دستگاه و قابل دسترس بودن آنها، لزوم تجهیز چنین دستگاههایی ضروری به نظر می‌رسد. این مقاله چکیده‌ای از یک طرح تحقیقاتی است، که در دانشگاه تبریز به اجرا درآمده است. در اینجا برای نیل به هدفهای یاد شده و دستیابی به نتایج بدست آمده از دستگاه پرتو ایکس، فرایند تحلیل کامپیوتری داده‌های XRD و XRF ارائه شده است.

واژه‌های کلیدی: *دادهٔ خام، بسامد قله‌ها، برازش خم.*

مقدمه

دستگاه پرتو ایکس، شدت و زاویه را به صورت رقمی نشان می‌دهد. با ساخت و نصب یک مدار واسط الکترونیکی اعداد را گرفته و به حافظه کامپیوتر انتقال داده می‌شود. این اعداد به نام "دادهٔ خام" تلقی و در فایلی ذخیره می‌شود. نمایش یک سری "دادهٔ خام" در شکل ۱ آمده است. این شکل نشان می‌دهد که چنین علامتی به صورت ترکیبی از سه

[Downloaded from ijcm.ir on 2025-07-03]



شکل ۱

بسامد ظاهر شده است:

۱- بسامد بالا یا نوفه که روی زمینه[1] و پیام قرار گرفته است.

۲ـ بسامد میانی: که شامل اطلاعات (قله‌ها) هستند.

۳ـ بسامد پایین یا زمینه.

بدیهی است که از سه مورد بالا فقط مورد ۲ در کاربردها حائز اهمیت است، یعنی بسامدی که ما آنرا اصطلاحاً "بسامد قله‌ها" نام نهاده‌ایم. برای دستیابی به "بسامد قله‌ها" نخست باید بسامد بالا یا نوفه را حذف کنیم.

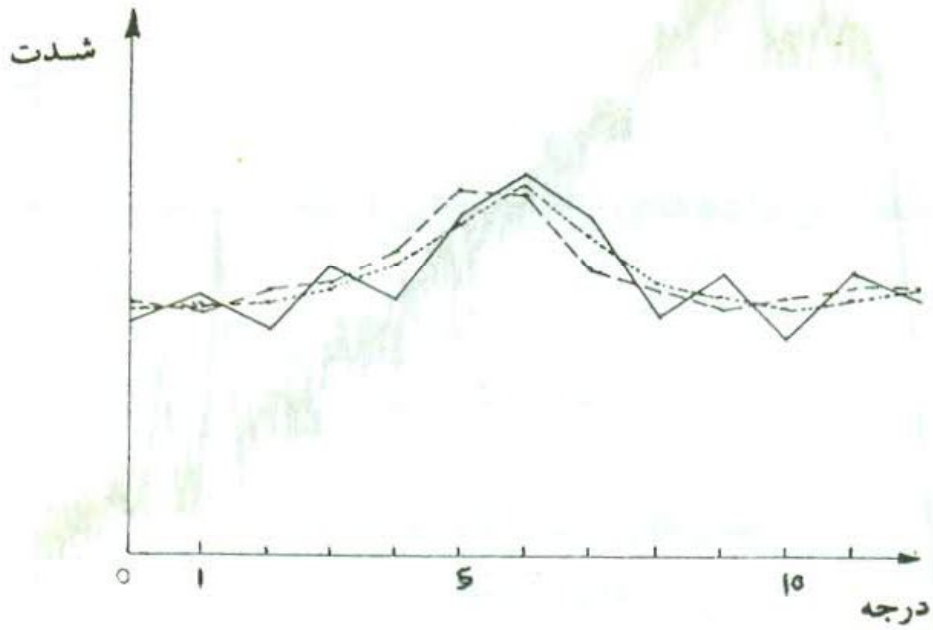
پس از شناسایی قله و جداسازی زمینه، به ذخیره محل قله‌ها در فایلی اقدام می‌شود. در نهایت موقعیت قله‌ها با جدولی که در حافظهٔ کامپیوتر است، مقایسه و به نوع عناصر یا ترکیب موجود در جسم مورد آزمایش پی برده می‌شود.

۱ ـ انتگرال گیری از سیگنال داده‌های خام

برای بدست آوردن یک منحنی هموار، می‌توان از سیگنال داده‌های خام به روشی

1- Background

[Downloaded from ijcm.ir on 2025-07-03]



شکل ۲

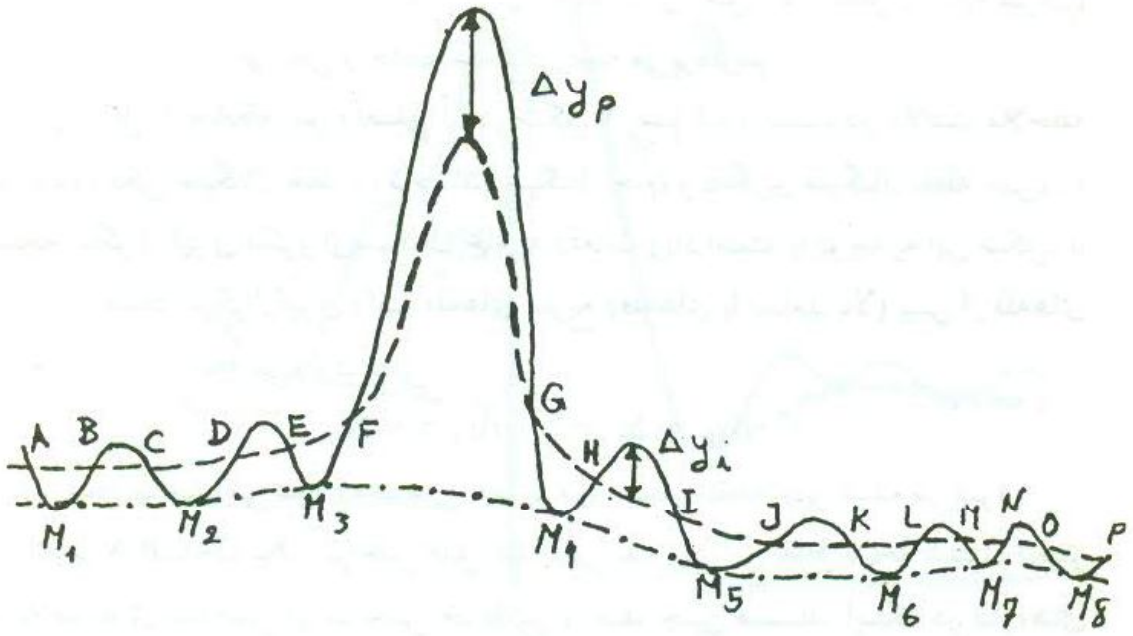
(مانند روش ذوزنقه) انتگرال گیری کرد و از روی آن نقاط، که ظاهراً نقاط تیزی بنظرمی‌رسند، به منحنی هموار رسید. در شکل ۲ نمودار شدت برحسب درجه استفاده از این روش را نشان می‌دهد.

۲ ـ برازش خم [۱]

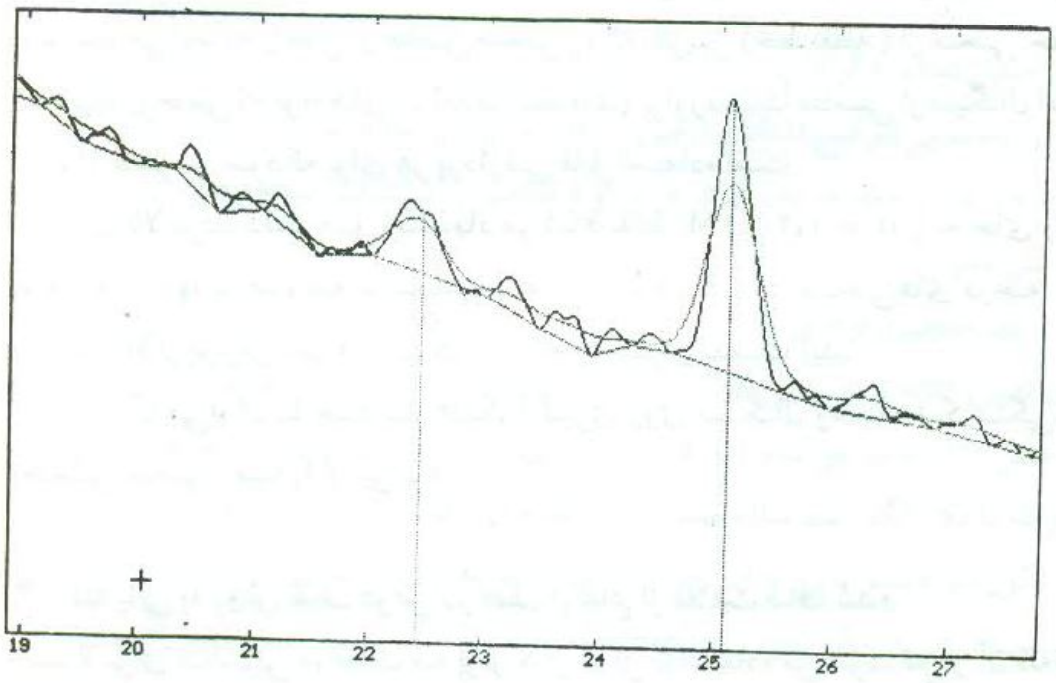
برازش خم، روشی است که در آن می‌توان از چند نقطهٔ موجود در یک صفحه خطی یا منحنی با بهترین شرایط (کمترین فاصله‌ها نسبت به نقاط یا روی بعضی از نقاط) گذراند. پیش از پرداختن به موضوع، بهتر است در این مورد توضیحاتی داده شود.

مسئله اساسی در برازش خم را می‌توان چنین توصیف کرد: فرض کنیم که دریک رشته از اندازه‌گیریهایی که روی کمیتهای x و y انجام گرفته است مقادیری از هر یک در اختیار داریم اکنون می‌خواهیم یک ارتباط تابعی مانند $y = f(x)$ بین x و y چنان برقرار کنیم که برازش مناسبی با مقادیر اندازه‌گیری شدهٔ (x_i,y_i) داشته باشد، به طوری که بتوان با استفاده از x مقادیر مناسبی برای y اندازه‌گیری نشده به دست آورد.

[Downloaded from ijcm.ir on 2025-07-03]



شکل ۳



شکل ۴

[Downloaded from ijcm.ir on 2025-07-03]

۳ ـ حذف تقریبی سیگنال زمینه از سیگنال نرم شده

پس از حذف بسامد بالا، که در عمل برای انجام آن از الگوریتم (انتگرال و نرم کردن) استفاده می‌کنیم، به بررسی و حذف سیگنال زمینه می‌پردازیم:

در شکل ۳ چنانکه نمونه اصلی آن در شکل ۴ رسم شده است، دو علامت ملاحظه می‌شود، یکی سیگنال خط پر، نرم شدهٔ سیگنال خام، و دیگری سیگنال نقطه چین، که نتیجه انتگرال گیری مکرر از سیگنال خام به دفعات زیاد است. با توجه به این شکل، با افزایش دفعات انتگرال‌گیری دامنه قله‌های سریع (قله‌های با بسامد بالا) بیش از قله‌های کوچک (نرم) کاسته می‌شود. یعنی

$$\Delta y_p > \Delta y_i \quad \text{یا} \quad \Delta y_p >> \Delta y_i$$

و این عمل موجب می‌شود که منحنی خط پر دور منحنی نقطه چین تنیده می‌شود.

نقاط A,B,C,D,...,K,... براحتی قابل شناسایی‌اند، زیرا این نقاط نتیجهٔ کنترل تغییر علامت‌های تفاضل دو منحنی خط پر و خط چین هستند. اینک در بازه‌های AB.CD,EF,... (نقاطی که منحنی خط پر زیر منحنی نقطه چین است) کمینه‌ها دیده می‌شوند، که با M_1, M_2, M_3 نشان داده‌ایم و با وصل این نقاط به یکدیگر، زمینهٔ تقریبی به دست می‌آید. به راحتی از تفاضل منحنی زمینه تقریبی (خط نقطه) از منحنی خط پر (علامتهای خامی که نوفه‌های آن حذف نشده‌اند) برآورد نسبتاً مناسبی از سیگنال اصلی دلخواه ظاهر می‌شود که برای هر پردازشی قابل استفاده است.

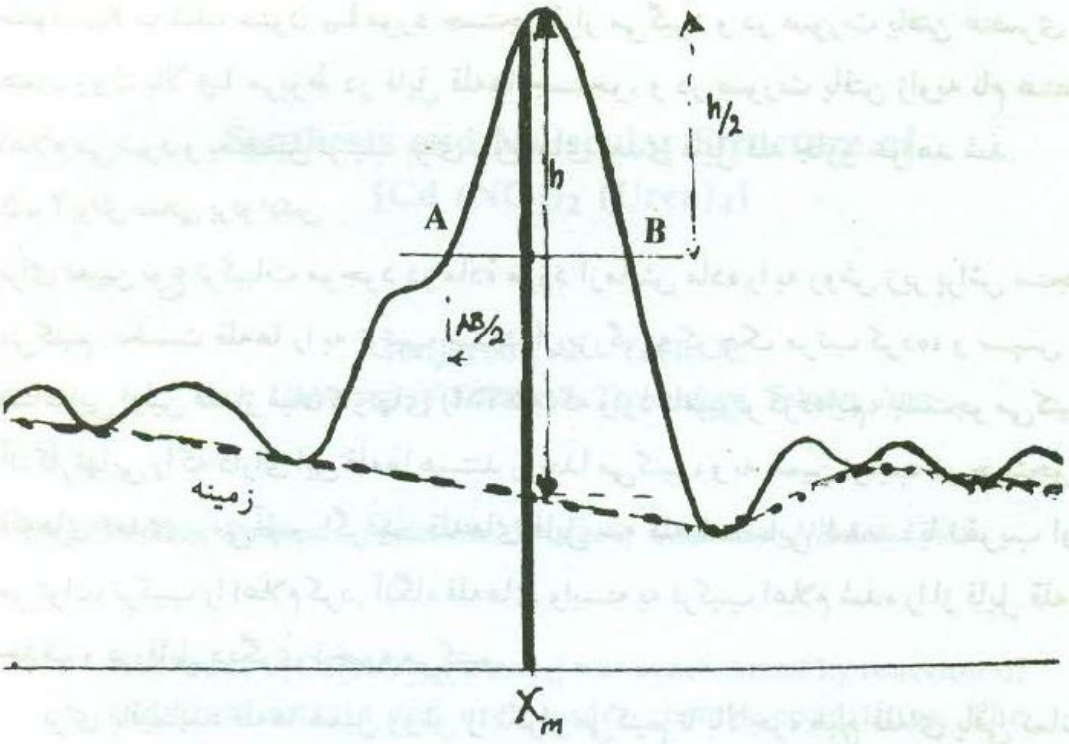
برای بالا بردن دقت عمل، پیشنهاد می‌شود نقاط M_i ($i = ۱،۲،...$) را به جای وصل کردن همه آنها به هم، سه تا سه تا یا بیشتر به هم وصل و با منحنی‌های درجه ۲ یا درجات بالاتر برازش شوند تا سیگنال زمینه مناسبتری بدست آید.

در پایان می‌توان با چند بار انتگرال‌گیری روی سیگنال زمینه، شکستگی‌های احتمالی منحنی زمینه را از بین برد.

۴ - قله یابی به روش نصف عرض در نصف ارتفاع از علامت صاف شده

معمولاً برای شناسایی موقعیت قلهٔ پرتو X از شکل ۵ استفاده می‌شود، که در آن قله‌های صاف شده و زمینه مشاهده می‌شوند. با محاسبه ارتفاع h نیم پهنا را می‌توان محاسبه کرد، و سپس با تعیین نقاط A و B و محاسبه $\frac{A+B}{۲}$ قله تعریف شده در پرتو سنجی که در شکل با X_m نشان داده شده، محاسبه می‌شود.

[Downloaded from ijcm.ir on 2025-07-03]



شکل ۵

۵ - تعیین عناصر و ترکیبات

پس از شناسایی موضع قله‌ها و ذخیره در فایل، باید برنامه‌ای نوشته شود تا قله‌ها از فایل خوانده و با مراجعه به جدولهای ویژه نوع عناصر و ترکیبات موجود در نمونه مورد آزمایش تعیین شوند.

۵ ـ ۱ طیف سنجی پرتو ایکس

برای تعیین عناصر به روش طیف سنجی، نخست نوع بلور مورد استفاده برای برنامه‌ای مشخص را انتخاب می‌کنیم (به عنوان یک ورودی) و سپس برنامه با مراجعه به جدول مربوطه با یک الگوریتم ساده محاسبه را انجام می‌دهد.

الگوریتم عنصر یابی به این صورت است که نخست قله‌های ذخیره شده در فایل را به ترتیب نزولی از نظر شدت (Intensity) مرتب می‌کند. سپس اولین زاویه را خوانده و با ستون K_α مطابقت می‌دهد. در صورت یافتن یک عنصر K_β مربوط را از جدول می‌خواند و زاویه را در فایل قله‌ها جستجو می‌کند. در صورت یافتن این زاویه، عنصر یافته به عنوان یکی از عناصر موجود در نمونه اعلام می‌شود. اگر اولین زاویه خوانده شده در

[Downloaded from ijcm.ir on 2025-07-03]

ستون K_α نبا شد، ستون L_α مورد جستجو قرار می‌گیرد و در صورت یافتن عنصری به همان روال بالا L_β مربوط در فایل قله‌ها جستجو، و در صورت یافتن زاویه نام عنصر اعلام می‌شود و به همین ترتیب برای زاویه‌های بعدی فایل قله جارو خواهد شد.

۵ ـ ۲ پراش سنجی پرتو ایکس

برای تعیین نوع ترکیبات موجود در مادهٔ مورد آزمایش ماده را به روش زیر پراش سنجی می‌کنیم: نخست قله‌ها را به ترتیب شدت از بزرگ به کوچک مرتب کرده، و سپس با شناسایی اولین قله از میان کارتهای (ASTM) که وارد کامپیوتر کرده‌ایم، جستجو می‌کنیم. آن کارتهایی را که دارای این قله‌ها هستند را جدا می‌کنیم، و به همین ترتیب در جستجوی قله‌های بعدی برمی‌آئیم. اگر بین قله‌های فایل سه قله شناسایی شدند، با تقریب اول می‌توان، ترکیب را اعلام کرد. آنگاه قله‌های وابسته به ترکیب اعلام شده را از فایل قله‌ها حذف و در فایل دیگری ذخیره می‌کنیم.

برای باقیمانده قله‌ها همین روش را تکرار می‌کنیم تا بالاخره هیچ قله‌ای باقی نماند. اگر قله‌ای بین کارت مورد نظر باشد، ولی بین قله‌های باقیمانده یافت نشود، به فایل ذخیره مراجعه خواهد شد، ودر صورت یافتن قله در فایل ذخیره ترکیب مورد نظر اعلام خواهد شد.

در این روش سرعت جستجو و یافتن ترکیبات بیشتر خواهد بود. اگر بخواهیم کمی دقیق‌تر شویم، هنگام جستجوی قله‌های کارت بین قله‌های فایل، اگر هشت مورد از قله‌ها پیدا شود، ترکیب مورد نظر اعلام می‌شود. روش فوق برای تعداد کارتهای کم (حداکثر در حدود هزار کارت) که افزایش سرعت پردازش و نتیجه گیری سریع مورد نظر است به کار برده می‌شود. در غیر اینصورت روش «هانووالت» به عنوان الگوریتم اصلی برای شناسایی ترکیبات مورد استفاده قرار می‌گیرد.

[Downloaded from ijcm.ir on 2025-07-03]