

## Modeling and analysis of X-ray diffraction in square and triangular arrays

M. Sovizi<sup>1</sup>, M. Jafari Pouya<sup>1</sup>, M. Aliannezhadi<sup>1\*</sup>

Submit Date: 2017.07.30  
Revise Date: 2018.10.31  
Accept Date: 2019.02.16

### Abstract

X-ray diffraction is a very practical and useful method for characterizing crystals, viruses, including influenza viruses, microscopic particles in biological sciences *etc.* So, X-ray diffraction is simulated and analyzed in the paper. The calculations are performed using the Green's function by written FORTRAN codes. Also, atoms in a crystal are proposed to be the same as circular apertures and diffraction patterns of square and triangular arrays are studied. In this approach the apertures represent the core of the crystal atoms, and the X-ray diffraction pattern is simulated by passing electromagnetic waves from these apertures. The results show that the general diffraction patterns are independent of the number of crystal atoms, so they can be used as a fingerprint to examine a variety of crystal structures. Also, the increase in the atoms sizes (atomic radius) leads to raise the intensity of the diffraction pattern. The increase in the crystal lattice constant reduces divergence and higher order diffraction patterns appear.

**Keywords:** Diffraction, X-ray diffraction, Crystal lattice, Laue method, Green's function.

---

<sup>1</sup> Department of Physics, Semnan University, Semnan, Iran.

\* Corresponding author: [m\\_aliannezhadi@semnan.ac.ir](mailto:m_aliannezhadi@semnan.ac.ir)

<https://jap.alzahra.ac.ir/>

## مدل سازی و تحلیل پراش اشعه X در آرایش‌های مربعی و مثلثی<sup>۱</sup>

مهدی سویزی<sup>۲</sup>، محمد جعفری پویا<sup>۲</sup>، مریم علیان‌نژادی<sup>۲\*</sup>

تاریخ ارسال: ۱۳۹۶/۰۵/۰۸

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۷/۰۸/۰۹

تاریخ تصویب: ۱۳۹۷/۱۱/۲۷

### چکیده

پراش اشعه X نقش مؤثری در شناسایی بلورها، ویروس‌ها از جمله ویروس آنفولانزا، عوامل ذره‌بینی در علوم زیستی و... دارد، بنابراین در این مقاله پراش اشعه X شبیه‌سازی و بررسی و تجزیه و تحلیل شده است. محاسبات با استفاده از تابع گرین و با نوشتن برنامه به زبان فرترن انجام شده است. برای شبیه‌سازی طرح معادل‌سازی ساختار بلور با روزنه‌های دایره‌ای پیشنهاد شده و شدت موج پراش یافته از آرایش‌های مربعی و مثلثی از روزنه‌ها بررسی شد. در این روش روزنه‌ها در واقع نقش اتم‌های بلور را بازی می‌کنند و طرح پراش اشعه ایکس با عبور امواج الکترومغناطیسی از این روزنه‌ها شبیه‌سازی می‌شود. بررسی‌ها نشان می‌دهد که طرح کلی پراش از تعداد اتم‌های بلور مستقل بوده و بنابراین می‌توان آن را مانند اثر انگشت برای بررسی انواع شبکه‌های بلور به کار برد. همچنین

<sup>۱</sup> شناسه دیجیتال (DOI): 10.22051/jap.2019.16599.1076

<sup>۲</sup> دانشکده فیزیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران.

\* نویسنده مسئول: m\_alianezhadi@semnan.ac.ir

افزایش ابعاد اتم‌ها به افزایش شدت در طرح پراش می‌انجامد و افزایش ثابت شبکه نیز باعث کاهش واگرایی و ظهور مرتبه‌های بالاتر در طرح پراش می‌شود.

**واژه‌های کلیدی:** پراش، پراش اشعه X، شبکه بلور، روش لایه، تابع گرین.

## ۱. مقدمه

روش XRD یا همان پراش اشعه X تکنیکی قدیمی و پر کاربرد در بررسی خصوصیات بلورها و طیف‌سنجی است. در سال ۱۹۱۲ با استفاده از اشعه X که ماهیت موجی دارد، نشان داده شد که بلورها از تکرار منظم قسمت‌های بنیادی (سلول‌های واحد) تشکیل شده‌اند. سپس پراش اشعه X به‌عنوان یکی از روش‌های اساسی برای شناسایی طیف وسیعی از مواد به کار گرفته شد [۱]. با توجه به این که طول موج پرتوهای X از مرتبه فواصل بین اتم‌ها در مواد بلوری است، بنابراین پراش اشعه X برای شناسایی ساختار ریز مواد بلوری بسیار حائز اهمیت است. رابطه اصلی براگ گویای این مطلب است که تداخل سازنده پرتوهای بازتابیده از دو سطح مختلف بلورها زمانی ایجاد می‌شود که اختلاف راه دو تابش مضرب صحیحی از طول موج باشد [۲]. طرح پراش جسم بلوری می‌تواند برای شناسایی آن جسم به کار می‌رود. طرح‌های حاصل از تعداد زیادی اتم در جهت‌های مختلف می‌تواند جزئیات طرح ساختمانی اتم‌ها را در بلور نشان دهد و بنابراین با این روش می‌توان اطلاعات دقیقی از شکل ساختمانی ترکیب به دست آورد [۳].

در پراش اشعه X از بلورها مشاهده می‌شود که شدت اشعه X بازتابیده که در هر اتم به صورت کشسان (بدون تغییر طول موج) پراکنده شده‌اند، در زوایای خاصی بیشینه خواهد بود و در بقیه زوایا بسیار ناچیز است [۴]. وقتی که دسته پرتوی X به یک بلور می‌تابد، بخشی از پرتوها هنگام عبور از بلور در جهت‌های گوناگون پراکنده می‌شوند. نکته مهم این است که زاویه انحراف پرتوی X از راستای اولیه به نحوه قرارگیری اتم‌ها در بلور بستگی دارد. اگر آشکارساز مولتی-پیکسل در آن سوی بلور قرار دهیم، پرتوهای پراکنده نقاط سیاهی بر روی فیلم ایجاد می‌کنند [۵]. از آنجا که الگوی پراش جسم علاوه بر جذب به تغییرات ضریب شکست جسم نیز بستگی دارد، تغییر فاز ایجاد می‌شود و تأثیر این تغییر بسیار بیشتر از تغییرات دامنه است و باعث تصویربرداری با دقت مطلوب و کسب اطلاعات دقیق می‌شود [۶]. شکل یا الگویی که مجموع این نقاط روی آشکارساز ایجاد می‌کنند، به ساختار ماده بستگی دارد. این قبیل تصویربرداری‌ها به وسیله اشعه X با تابش سنکروترون توسط شتاب‌دهنده‌های بزرگ تولید شده‌اند [۷، ۸]. بنابراین به راحتی می‌توان از الگوی پراش پرتوی X به ساختار سه‌بعدی جسم پی برد که به  $GI^1$  معروف است [۹].

<sup>1</sup> Ghost imaging

استفاده از پراش اشعه X یکی از قویترین روش‌ها برای تعیین ساختار ویروس‌ها است و این روش دید ما را از دنیای ویروس‌ها عمیقاً تغییر داده است [۱۰]. پیچیدگی روزافزون ویروس‌ها و ابعاد ساختاری آن‌ها در واقع محرک اصلی تحولات روش‌شناختی و مفهومی در بلورشناسی ماکرومولکولی با اشعه X<sup>۱</sup> است [۱۱، ۱۲]. ویژگی‌های ویروس‌های جدید نیز دقیقاً شبیه به اولین ویروس‌های حیوانی، ویروس‌های دارای غشا یا ساختار ویروس آنفلوآنزا با استفاده از روش‌های بلورشناسی اشعه X یا به عبارتی پراش اشعه X تعیین می‌شوند [۱۳]. همچنین پراش اشعه X به عنوان شیوه مناسب برای بررسی نارسایی‌های پروئینی، سیستم‌های غیربلوری و غیر تعادلی مطرح و مورد استفاده قرار گرفته است [۱۴].

برهمکنش‌های اشعه X با اتم‌ها و مواد به صورت گسترده در پزشکی نیز مهم و کاربردی است. از جمله این برهمکنش‌ها می‌توان به رادیوگرافی اشاره کرد که در آن باریکه اشعه X پس از گذشتن از بدن بیمار به فیلم حساس عکاسی تابانده می‌شود. جذب اشعه X در استخوان‌ها بیشتر از پوست و گوشت است، بنابراین تصویر استخوان‌ها در فیلم روشن‌تر و تصویر اندام‌های دیگر تاریک‌تر خواهد بود. فلوروسکوپی نوعی رادیوتراپی است که تصاویر پیوسته‌ای که با اشعه X گرفته شده است را بر روی صفحه مونیتور نشان می‌دهد. در فلوروسکوپی اشعه X از بدن فرد بیمار عبور داده می‌شود و سپس این پرتوها به صفحه فلوروسان برخورد می‌کنند و پزشک از پشت این صفحه می‌تواند تصویر عملکرد اندام‌های فرد بیمار را ببیند. گاهی ماده بی‌ضرری در هنگام رادیوگرافی به بدن بیمار تزریق یا به او خورانده می‌شود تا اندام مورد نظر آشکارتر دیده شود مثلاً ممکن است پزشک پیش از رادیوگرافی با اشعه X از روده به بیمار محلول سولفات باریم بخوراند. این ماده اشعه X را جذب می‌کند و در نتیجه تصویر روده‌ها روشن‌تر دیده می‌شود [۱۶-۱۸]. همچنین اشعه X در درمان سرطان از قبیل سرطان کبد که یکی از شایع‌ترین علل مرگ و میر در سراسر جهان است، کاربرد فراوان دارد [۱۹]. درمان سرطان کبد با این شیوه موضوع اصلی پژوهش‌های روز دنیا می‌باشد. این اشعه سلول‌های سرطانی را زودتر از سلول‌های سالم از میان می‌برد. اگر به غده سرطانی به اندازه لازم اشعه X بتابانند، آن غده سرانجام بی‌آنکه به سلول‌های سالم آسیب زیاد برسد، از بین می‌رود [۲۰].

مطالبی که گفته شد تنها بخشی از تأثیر پراش اشعه X در روند پیشرفت علم کنونی است. همانطور که گفته شد پراش اشعه X نقش مؤثری در شناسایی بلورها، ویروس‌ها، عوامل ذره‌بینی در علوم زیستی و... دارد. بنابراین، هدف این مقاله بررسی عددی پراش اشعه X در بلورهای

<sup>1</sup> X-ray macromolecular crystallography

مختلف است. برای شبیه‌سازی، طرح معادل‌سازی ساختار بلور با روزنه‌های دایره‌ای و بررسی پراش آن‌ها پیشنهاد شده است که با توجه به اطلاعات نویسندگان این کار برای اولین بار انجام شده است. در بررسی طرح پراش نسبت کمیت‌ها به طول موج به جای مقدار کمیت‌ها مهم است. در نتیجه اگر با طول موج خاصی طرح پراش ایجاد کنیم، بدون تغییر در ظاهر طرح و با حفظ نسبت‌های چیدمان به طول موج می‌توانیم آن را به هر طول موج دلخواه دیگر تعمیم دهیم. بنابراین اگر شبیه‌سازی در حوزه اپتیکی انجام شود و سپس تمامی مقادیر تقریباً صد برابر کوچک شوند، طرح پراش اشعه X از بلورهای دو بُعدی به دست خواهد آمد. در نتیجه با تهیه این روزنه‌ها در آزمایشگاه و با استفاده از نور مرئی می‌توان به طرح‌های پراش کاملاً شبیه به طرح پراش اشعه X رسید که بسیار مهم و حائز اهمیت است، زیرا دسترسی به منبع نوری (لیزرهای مرئی مانند لیزرهای هلیوم نئون یا نیمه هادی‌های ارزان قیمت) آسانتر و ارزانتر از دسترسی به چشمه اشعه X است. در این مقاله جواب معادله موج تکفام با استفاده از تابع گرین و به روش انتگرالی محاسبه شده است و برنامه مورد نیاز به زبان فرترن نوشته شده است. سازمان‌دهی مقاله به این شکل است که در بخش بعد در ابتدا مبانی و تئوری بیان شده، سپس نتایج محاسبات عددی و شبیه‌سازی‌ها ارائه و در پایان نتیجه‌گیری ارائه شده است.

## ۲. مبانی و تئوری

برای بررسی پراش اشعه X عبوری می‌توان اتم‌های تشکیل‌دهنده مواد را که نقش پراش اشعه X را ایجاد می‌کنند، به صورت تعدادی روزنه با شکل دلخواه و در مکان‌های دلخواه بر روی یک مانع مسطح و کاملاً کدر در نظر گرفت. یک ساختار کاملاً دلخواه در شکل ۱ نشان داده شده است. می‌توان آرایش منظم اتم‌ها را در یک بلور با روزنه‌های دایره‌ای که در آرایش‌های منظم روی مانع چیده شده‌اند، معادل‌سازی کرد. این روزنه‌ها در واقع نماینده اتم‌های تشکیل‌دهنده بلور می‌باشند که نقش پراش اشعه X را ایجاد می‌کنند. موج الکترومغناطیسی از سمت چپ با زاویه تابش دلخواه به روزنه‌ها می‌تابد و پس از عبور از روزنه‌ها طرح پراش ایجاد می‌شود. مانع به گونه‌ای انتخاب شده که موج از آن عبور نکند، بنابراین موج در سمت راست روزنه‌ها از برهم‌نهی امواج عبوری از تک تک روزنه‌ها ایجاد می‌شود. موج عبوری با فرض تکفام بودن موج تابشی در معادله زیر صدق می‌کند

$$\nabla^2 E(X) + k^2 E(X) = 0, \quad k = 2\pi n / \lambda_0 \quad (1)$$

که در آن،  $E(X)$  میدان الکتریکی در نقطه  $X$ ،  $k$  اندازه بردار موج،  $\lambda_0$  طول موج در خلأ و  $n$  ضریب شکست محیط است. برای حل این معادله و یافتن جواب منحصر به فرد باید شرایط مرزی

حاکم بر مسئله به طور کامل مشخص شود. در شکل ۱، مرز  $\Gamma$  نشان داده شده است. این مرز شامل سه بخش مانع و روزنه‌ها و مرز بینهایت است. همانطور که بیان شد میدان روی سطح مانع برابر با صفر است. از طرفی میدان فقط از روزنه‌ها عبور می‌کند و از دیگر نقاط فضا به داخل ناحیه  $\Omega$  در شکل ۱ نفوذ نمی‌کند. بنابراین میدان فرودی بر روی مرز بینهایت نیز برابر با صفر است. به عبارت دیگر داریم

$$E(X)|_{\Gamma_0} = 0; \quad E(X)|_{\Gamma_\infty} = 0 \quad (۲)$$

در این مقاله برای حل معادله (۱) از روش انتگرالی و قضیه گرین استفاده شده است. معادله گرین متناظر با معادله (۱) به صورت زیر است

$$\nabla^2 G(X, X') + k^2 G(X, X') = -\delta(X - X') \quad (۳)$$

با توجه به اینکه معادله (۱) باید در سه بعد حل شود، تابع گرین مناسب به صورت زیر است

$$G(X, X') = \frac{e^{ikR}}{4\pi R}, \quad R = |X - X'| \quad (۴)$$

همچنین شکل دوم قضیه گرین نیز به شکل زیر بیان می‌شود

$$\int_{\Omega} \psi(X) \nabla^2 \varphi(X) - \varphi(X) \nabla^2 \psi(X) d\Omega = \iint_{\Gamma} (\psi(X) \vec{\nabla} \varphi(X) - \varphi(X) \vec{\nabla} \psi(X)) \cdot \hat{n} d\Gamma \quad (۵)$$

که در آن،  $\Omega$  ناحیه‌ای دلخواه و  $\Gamma$  مرز احاطه‌کننده این ناحیه است.  $\hat{n}$  بردار نرمال عمود بر مرز و به سمت بیرون ناحیه است. توابع  $\psi$  و  $\varphi$  دو تابع دلخواه (پیوسته و مشتق‌پذیر) در داخل ناحیه  $\Omega$  هستند. معادله دیفرانسیل (۱) با استفاده از روابط (۳) و (۵) به رابطه زیر تبدیل می‌شود

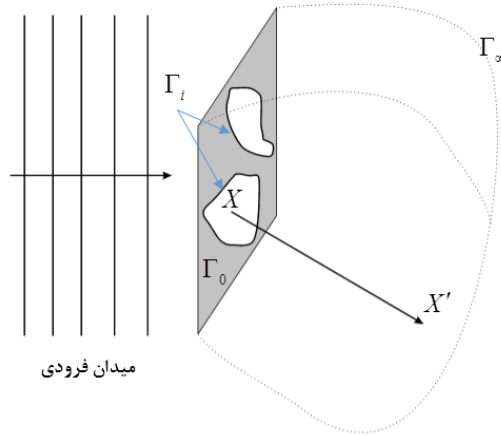
$$E(X') = \iint_{\Gamma} G(X, X') \frac{\partial E(X)}{\partial n} - E(X) \frac{\partial G(X, X')}{\partial n} d\Gamma \quad (۶)$$

که در آن،  $\frac{\partial(\cdot)}{\partial n} = \vec{\nabla}(\cdot) \cdot \hat{n}$  را از این پس مشتق نرمال می‌نامیم. موقعیت نقاط  $X$  و  $X'$  در شکل ۱ نشان داده شده است. همان طور که بیان شد مرز  $\Gamma$  شامل سه بخش مجزا است. در نتیجه انتگرال مرزی رابطه (۶) به سه انتگرال مرزی تقسیم می‌شود. با استفاده از شرایط مرزی (۲) انتگرال بر روی مرزهای  $\Gamma_0$  و  $\Gamma_\infty$  صفر می‌شود و فقط انتگرال بر روی مرزهای  $\Gamma_i$  باقی می‌ماند

$$E(X') = \sum_{i=1}^N \iint_{\Gamma_i} G(X, X') \frac{\partial E(X)}{\partial n} - E(X) \frac{\partial G(X, X')}{\partial n} d\Gamma \quad (۷)$$

با دقت در این رابطه مشاهده می‌شود که اگر میدان و مشتق نرمال آن بر سطح روزنه‌ها معلوم باشد، می‌توان میدان را در هر نقطه دلخواه داخل ناحیه  $\Omega$  محاسبه کرد. از طرفی میدان بر سطح روزنه‌ها در واقع همان میدان فرودی است که معلوم است و علاوه بر آن می‌توان مشتق آن را نیز محاسبه کرد. به عبارت دیگر برای محاسبه میدان در هر نقطه دلخواه در سمت راست روزنه‌ها کافی است

انتگرال رابطه (۷) را محاسبه کرد. همچنین نکته‌ی حائز اهمیت اینجاست که اگرچه در این مقاله روزنه‌های دایره‌ای استفاده خواهد شد، این روش قادر به محاسبه‌ی طرح پراش از هر روزنه با شکل دلخواه است.



**شکل ۱** نمایی از میدان فرودی، مانع ( $\Gamma_0$ )، روزنه‌ها ( $\Gamma_i$ ) و مرزها ( $\Gamma_\infty$ ). جهت تاکید بر این نکته که این روش قابلیت محاسبه طرح پراش مربوط به روزنه‌هایی با شکل دلخواه را دارد، روزنه‌ها به شکل نامعین و دلخواه ترسیم شده‌اند ولی در محاسبات نقش اتم‌ها با روزنه‌های دایروی تقریب زده شده‌اند.

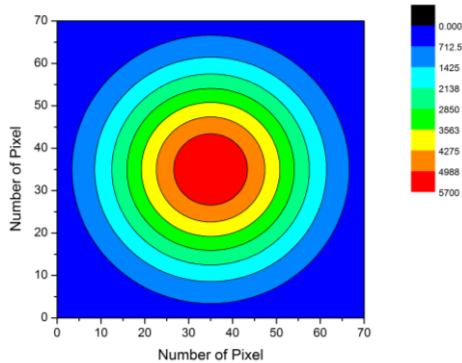
### ۳. نتایج شبیه‌سازی و تحلیل نتایج

به منظور اعتبارسنجی در ابتدا پراش از تک‌روزنه دایره‌ای بررسی و نتایج با حل تحلیلی این حالت خاص مقایسه شده است. در شکل ۱۲ الف نمودار سطح مقطع توزیع شدت بر پرده نمایش در فاصله  $d/\lambda = 150$  از تک‌روزنه دایره‌ای با شعاع  $R/\lambda = 2$  ترسیم شده است. در این مقاله ابعاد طولی در تمام بخش‌ها و شکل‌ها و نمودارها نسبت به طول موج بهنجار شده است. با استفاده از این طرح می‌توان نیم‌زاویه واگرایی را از رابطه زیر محاسبه کرد

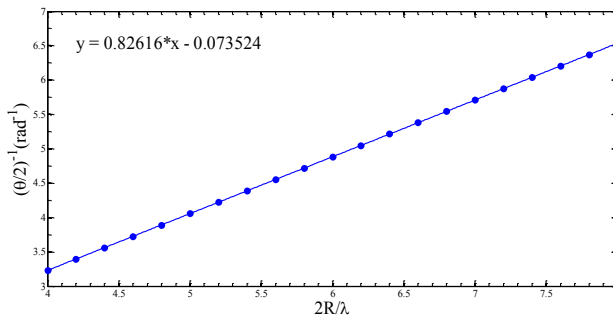
$$\tan(\theta/2) = a/d \quad (۸)$$

که  $a$  شعاع لکه مرکزی و  $d$  فاصله پرده نمایش تا روزنه است.

در شکل ۲ ب نمودار معکوس نیم‌زاویه واگرایی برحسب قطر بهنجار شده ( $D = 2R/\lambda$ ) برای تک‌روزنه‌های دایره‌ای نشان داده شده است. معکوس شیب این نمودار برابر با  $1/211$  است که مقایسه آن با پاسخ تحلیلی تک‌روزنه دایره‌ای ( $\theta = 1.22\lambda/D$ )، بیانگر دقت محاسبات می‌باشد. همچنین نتایج شکل (۲ ب) نشان می‌دهد که واگرایی با افزایش شعاع روزنه کاهش می‌یابد.



(الف)



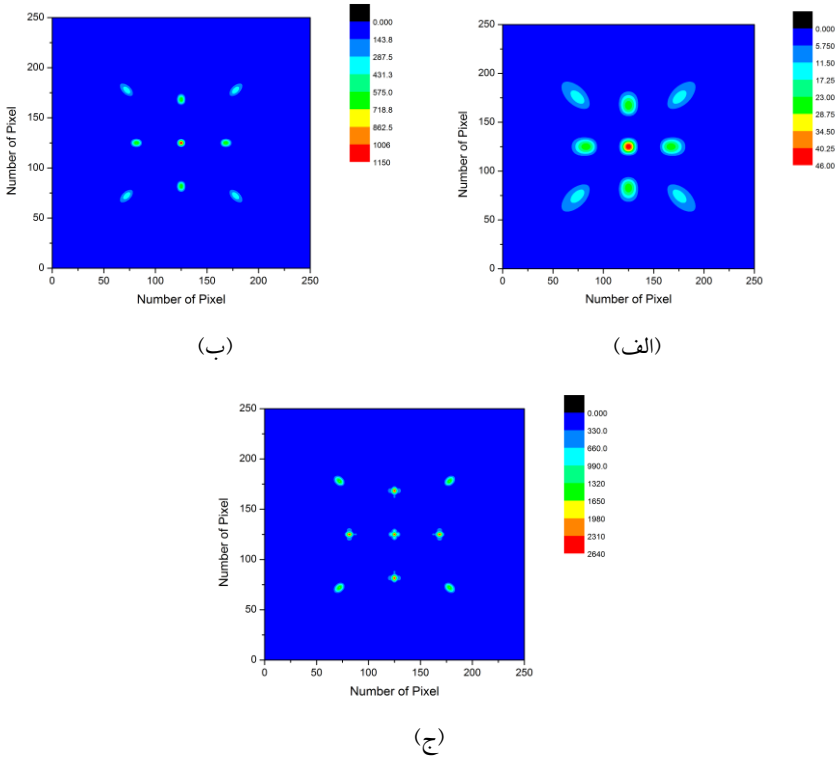
(ب)

**شکل ۲ الف**- توزیع شدت طرح پراش از تک‌روزنه دایره‌ای در صفحه‌ای با فاصله  $d/\lambda = 150$  از روزنه (شعاع روزنه برابر با ۲ و اندازه هر پیکسل برابر با ۱ است) و ب- عکس نیم‌زاویه و آگرایی موج پراش یافته از روزنه دایره‌ای بر حسب قطر روزنه.

در مرحله بعد طرح پراش اشعه X از ساختار بلوری شبیه‌سازی شده است. برای انجام این کار تعدادی روزنه دایره‌ای را که به منزله اتم‌ها هستند، در آرایش منظم بر روی مانع کدر ایجاد کرده و طرح پراش آن با روش بیان‌شده در این مقاله شبیه‌سازی شده است. طرح‌های ایجاد شده معروف به طرح لاوه عبوری هستند که توسط عبور اشعه X از یک لایه نازک بلوری (مانند یک لایه بسیار نازک فلزی) تشکیل می‌شود.

به منظور بررسی طرح پراش یک بلور تک‌اتمی تعداد ۹ روزنه در یک آرایش مربعی  $3 \times 3$  در نظر گرفته شده است. شعاع روزنه‌ها برابر با  $R/\lambda = 0.2$ ، ثابت شبکه برابر با  $a/\lambda = 2$  و فاصله پرده نمایش تا روزنه‌ها برابر با  $d/\lambda = 150$  در نظر گرفته شده است. این آرایش روزنه‌ها، نمایی دوبعدی از یک بلور تک‌اتمی ارائه می‌دهد. طرح پراش این بلور در شکل ۳ الف نشان داده شده است.



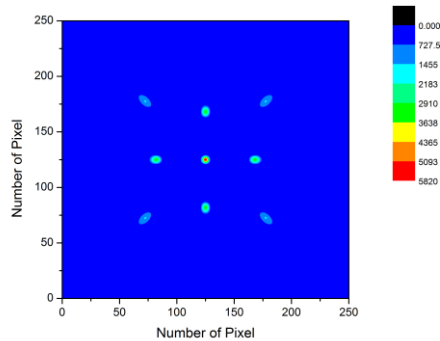


شکل ۳ طرح پراش از آرایش الف) ۹ تایی، ب) ۴۹ تایی و ج) ۱۲۱ تایی در بلوری با شعاع روزنه  $R/\lambda = 0.2$ ، ثابت شبکه  $a/\lambda = 2$  و فاصله پرده نمایش تا روزنه‌ها  $d/\lambda = 150$ .

همچنین برای بررسی تأثیر تعداد اتم‌های بلور در طرح پراش در مرحله بعد ابعاد روزنه‌ها و ثابت شبکه تغییر داده نشده اما تعداد آن‌ها به ۴۹ (آرایش  $7 \times 7$ ) و ۱۲۱ (آرایش  $11 \times 11$ ) روزنه افزایش یافته است. طرح‌های پراش مربوط به این دو آرایش به ترتیب در شکل‌های ۳-ب و ۳-ج نشان داده شده است. نتایج طرح‌های پراش شکل‌های ۳-الف تا ۳-ج نشان می‌دهد که افزایش تعداد روزنه‌ها تأثیری در طرح کلی پراش نداشته و فقط تغییرات اندکی در جزئیات آن وارد کرده است. بنابراین نتایج مؤید این واقعیت مهم هستند که این طرح مختص آرایش مربعی است و اگر تعداد اتم‌ها در بلور افزایش یابد، طرح پراش تغییری نخواهد کرد. در نتیجه این طرح را می‌توان مانند اثر انگشت آرایش مذکور دانست و ویژگی‌های آرایش را با توجه به جزئیات طرح پراش به دست آورد.

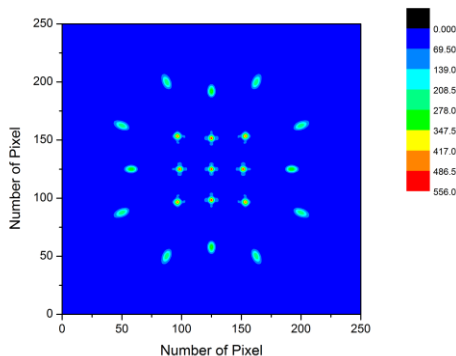
تأثیر ابعاد اتم‌های بلور در طرح پراش در شکل ۴ بررسی شده و نمودار طرح پراش آرایش

۴۹ تایی برای شعاع روزنه های  $R/\lambda = 0.3$  ترسیم شده است. مقایسه این شکل با شکل ۳-ب نشان می دهد که افزایش شعاع روزنه ها تأثیر چشمگیری در شدت طرح پراش دارد.

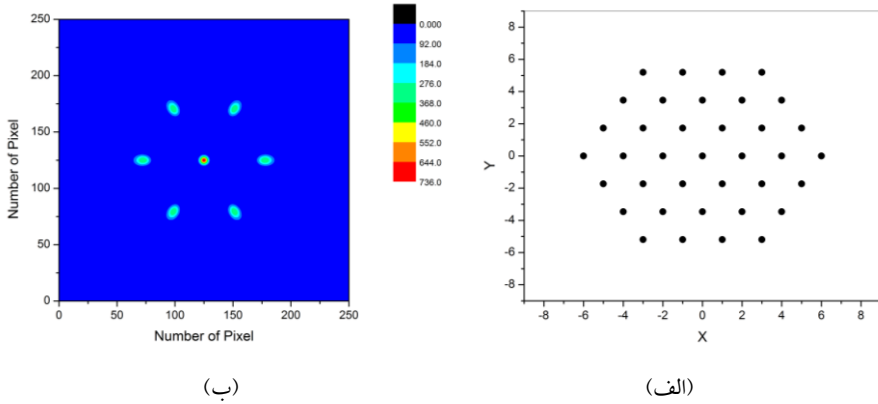


**شکل ۴-الف** طرح پراش از آرایش ۴۹ تایی با شعاع روزنه  $R/\lambda = 0.3$ ، ثابت شبکه  $a/\lambda = 2$  و فاصله پرده نمایش تا روزنه ها  $d/\lambda = 150$ .

در شکل ۵ نمودار طرح پراش در آرایش ۴۹ تایی با شعاع روزنه  $R/\lambda = 0.2$ ، ثابت شبکه  $a/\lambda = 3$  و در فاصله  $d/\lambda = 150$  نمایش داده شده است. مقایسه نتایج شکل ۵ با شکل ۳-ب نشان می دهد که به دلیل افزایش ابعاد کلی روزنه، واگرایی طرح پراش کاهش محسوسی یافته و لکه های ناشی از مرتبه های بالاتر پراش بر پرده نمایش ظاهر شده اند. در واقع به دلیل افزایش ابعاد کلی روزنه و کاهش واگرایی طرح پراش بدون تغییر در ظاهر، فقط کوچکتر شده است. با دقت در طرح پراش شکل ۵ و مقایسه آن با طرح پراش شکل ۳-ب مشاهده می شود که بخش میانی طرح پراش شکل ۵ در واقع تکرار طرح پراش شکل ۳-ب ولی با ابعاد کوچکتر است. بنابراین هر گونه تغییر ساختار شبکه بر طرح پراش ایجاد شده اثر گذار است.

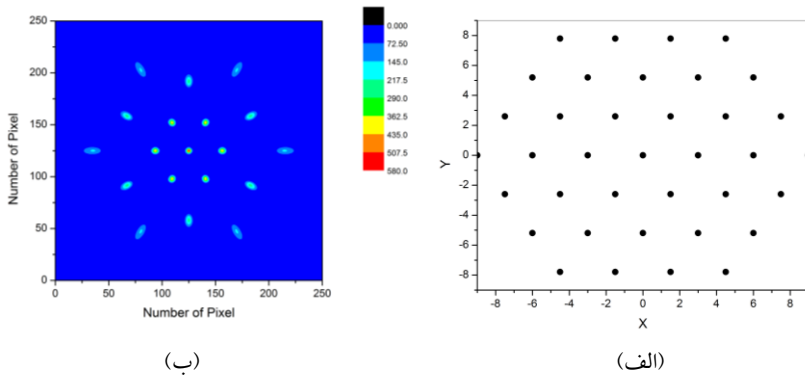


**شکل ۴-ب** طرح پراش از آرایش ۴۹ تایی با ثابت شبکه  $a/\lambda = 3$ ، شعاع روزنه  $R/\lambda = 0.2$ ، و فاصله پرده نمایش تا روزنه ها  $d/\lambda = 150$ .



**شکل ۵** آرایش ۳۷ تایی از شبکه مثلثی متشکل از (الف) روزنه‌هایی با شعاع  $R/\lambda = 0.2$ ، ثابت شبکه  $a/\lambda = 2$  و (ب) طرح پراش آرایش (الف) در فاصله  $d/\lambda = 150$

در ادامه طرح پراش مربوط به ساختاری با آرایش مثلثی مورد نظر است که برای این منظور روزنه‌های دایره‌ای به صورت مثلثی با ثابت شبکه  $a/\lambda = 2$  در نظر گرفته شده است. تعداد روزنه‌ها مطابق شکل ۶-الف برابر ۳۷ و شعاع آن‌ها برابر با  $R/\lambda = 0.2$  است. طرح پراش این ساختار در شکل ۶-ب نشان داده شده است.



**شکل ۶** آرایش ۳۷ تایی از شبکه مثلثی متشکل از (الف) روزنه‌های با شعاع  $R/\lambda = 0.2$ ، ثابت شبکه  $a/\lambda = 3$  و (ب) طرح پراش آرایش (الف) در فاصله  $d/\lambda = 150$

همچنین تأثیر تغییر ثابت شبکه در شکل ۷-الف بررسی شده و طرح پراش شبکه مثلثی ۳۷ تایی با ثابت شبکه  $a/\lambda = 3$  و ابعاد شکاف  $R/\lambda = 0.2$  نشان داده شده و در شکل ۷-ب طرح پراش این ساختار در فاصله  $d/\lambda = 150$  ترسیم شده است. مقایسه نتایج شکل ۶-ب و ۷-ب نشان می‌دهد با افزایش

ثابت شبکه فقط واگرایی موج پراشیده، کاهش یافته و طرح پراش مربوط به مرتبه‌های بالاتر نیز بر پرده ظاهر می‌شود ولی طرح کلی آن تغییر نکرده است. که این نتایج در تطابق با نتایج آرایش مربعی است. همچنین این نتایج مجدداً مؤید این مطلب است، که هر طرح پراش ارتباط مستقیم با شکل آرایش روزنه‌ها یا به عبارتی ساختار شبکه بلور دارد و تغییر در جزئیات شبکه فقط جزئیات طرح پراش را تغییر می‌دهد. در نتیجه هر طرح را می‌توان مشخصه شبکه خاصی در نظر گرفت و با توجه به شکل طرح پراش می‌توان از شبکه اطلاعاتی به دست آورد و شکل شبکه را پیش‌گویی کرد.

#### ۴. جمع‌بندی

پراش اشعه X نقش مؤثری در شناسایی مواد دارد. با استفاده از پراش اشعه X می‌توان به ساختار سه بعدی مواد پی برد. این علم به صورت گسترده در شناسایی ویروس‌ها و سایر مواد کاربرد دارد. پیچیدگی روزافزون ساختار ویروس‌ها منجر به تحقیقات وسیع با اشعه X شده است. در این مقاله پراش اشعه X مدل‌سازی و مورد بررسی قرار گرفته است. برای مدل‌سازی‌ها از تابع گرین استفاده شده و برنامه‌ها در زبان فرترن نوشته شده است. برای این منظور طرح معادل‌سازی ساختار بلور با روزنه‌های دایره‌ای پیشنهاد و طرح پراش تک‌روزنه دایره‌ای و سپس بلور تک‌اتمی در آرایش مربعی و مثلثی بررسی شد. نتایج بررسی طرح پراش تک‌اتم نشان داد که زاویه واگرایی برای هر طول موج مشخص با افزایش ابعاد اتم کاهش می‌یابد. بررسی آرایش مربعی از بلورهای تک‌اتمی با تعداد اتم‌های ۹ و ۴۹ و ۱۲۱ تایی و شعاع  $R/\lambda = 0.2$ ، ثابت شبکه  $a/\lambda = 2$  و در فاصله  $d/\lambda = 150$  نشان داد که طرح کلی پراش برای این آرایش با افزایش تعداد اتم‌ها تغییری نکرده و بنابراین این طرح پراش می‌تواند مانند اثر انگشت برای بررسی نوع شبکه بلور به کار رود. بررسی تأثیر افزایش ابعاد اتم‌ها در طرح پراش نشان داد که افزایش ابعاد اتم‌ها سبب افزایش شدت در طرح پراش می‌شود. همچنین افزایش ثابت شبکه در این ساختارها نیز سبب کاهش واگرایی و ظهور مرتبه‌های بالاتر در طرح پراش می‌شود. نتایج بررسی آرایش مثلثی با تعداد اتم‌های ۳۷ تایی نیز در این مقاله بررسی و طرح پراش این ساختارها ارائه شد. بررسی نتایج افزایش ثابت شبکه در این ساختارها نیز به نتایج مشابهی با آرایش مربعی انجامید و مرتبه‌های بالاتر پراش بر روی پرده ظاهر شدند.

#### مراجع

- [1] W. Friedrich, P. Knipping, and M. V. Laue; "Laue's geometrical theory"; *Annalen der Physik*, **41**(1912) 971-988
- [2] H. Freiser; *Concepts and Calculations in Analytical Chemistry*, CRC, Florida.1992

- [3] D. A. Skoog, D. M. West; *Principles of Instrumental Analysis*, Holt-Saunders, Tokyo, (1987)
- [4] H. Xu, J. S. J. Van Deventer; “Microstructural characterization of geopolymers synthesized from kaolinite/stilbite mixtures using XRD, MAS-NMR, SEM/EDX, TEM/EDX, and HREM”; *Cement and Concrete Research*, **32**, No. 11(2002) 1705-1716.
- [5] H. Liu, X. Shen, D. Zhu, and S. Han; “Fourier-transform ghost imaging with pure far-field correlated thermal light”; *Phys. Rev. A* **76**, No.5 (2007) 0538081-0538085.
- [6] F. Pfeiffer, T. Weitkamp, O. Bunk, and C. David; “Phase retrieval and differential phase-contrast imaging with low-brilliance X-ray sources”; *Nat. Phys.* **2**, No. 4 (2006) 258–261.
- [7] D. Pelliccia, A. Rack, M. Scheel, V. Cantelli, and D. M. Paganin; “Experimental X-Ray ghost imaging”; *Phys. Rev. Lett.* **117**, No. 11 (2016) 1139021-1139025.
- [8] H. Yu, R. Lu, S. Han, H. Xie, G. Du, T. Xiao, and D. Zhu; “Fourier-transform ghost imaging with hard X rays”; *Phys. Rev. Lett* **117**, No. 11 (2016) 113901-5.
- [9] A. Schori and S. Shwartz; “X-ray ghost imaging with a laboratory source”; *Optics Express* **25**, No. 13 (2017) 14822-14828.
- [10] S. A. Wynne, R. A. Crowther, A. G. W. Leslie; “The crystal structure of the human hepatitis B virus capsid”; *Mol Cell* **3** (1999) 771–780.
- [11] N. E. Chayen, J. R. Helliwell, E. H. Snell; “Macromolecular crystallization and crystal perfection”; *Oxford University Press*, Oxford (2010).
- [12] E. Garman; “Cool crystals: macromolecular cryocrystallography and radiation damage”; *Curr Opin Struct Biol* **13** (2003) 545–551.
- [13] N. Verdager, D. Garriga, I. Fita; “X-Ray Crystallography of Viruses”; *Structure and Physics of Viruses, Part of the Subcellular Biochemistry book series*, SCBI, volume **68**(2013) 117-144.
- [14] Z. Sayers, B. Aşar, E. Cholak, I. Karmous; “Application of advanced X-ray methods in life sciences”; *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)***1861**, No. 1, Part B (2017) 3671–3685.
- [15] C. Amabil, L. Farina, V. Lopresto *et al.*; “Tissue shrinkage in microwave ablation of liver: an ex vivo predictive model”; *International Journal of Hyperthermia* **33**, No. 1 (2016) 101-109.
- [16] M. Kemerink, T. J. Dierichs, J. Dierichs *et al.*; “The Application of X-Rays in Radiology: From Difficult and Dangerous to Simple and Safe”; *AJR American Journal of Roentgenology* **198**, No. 4 (2012) 754-759.
- [17] A. C. Thompson, E. M. Westbrook, W. M. Lavender and J. C. Nix; “A large area CMOS detector for shutterless collection of x-ray diffraction data”; *Journal of Physics: Conference Series* **493** (2014) 1-4.
- [18] M. C Zdora, P Thibault, T Zhou *et al.*; “X-ray Phase-Contrast Imaging and Metrology through Unified Modulated Pattern Analysis”; *Phys. Rev. Lett.* **118**, No. 20 (2017) 2039031- 2039036.
- [19] J. Liu, Y. Yang, W. Zhu *et al.*; “Nanoscale metal-organic frameworks for combined photodynamic & radiation therapy in cancer treatment”; *Biomaterials* **97** (2016) 1–9.
- [20] M. Oldham, P. Yoon, Z. Fathi, *et al.*; “X-Ray Psoralen Activated Cancer Therapy (X-PACT)”; *PLoS ONE journal* **11**, No. 9 (2016) 1-13.