

به نام خدای مهربان

رابطه شرر (فرمول زیر)، رابطه‌ای برای محاسبه اندازه متوسط کریستالیت‌ها بر اساس داده‌های نمودار طیف پراش پرتو ایکس (XRD) نمونه است.

$$\tau = \frac{K\lambda}{\beta \cos\theta}$$

که در آن:

τ : اندازه متوسط کریستالیت (برحسب نانومتر)

K : ضریب شکل بلور

K در واقع از ۰/۶۲ تا ۲/۰۸ تغییر می‌کند، اما معمولاً در حالت گرد شده و تقریبی یک در نظر گرفته می‌شود. در بلورهای کروی با تقارن کوبیک، این مقدار ۰/۹۴ است. مقادیر ۱/۰۳ و ۰/۸۱ به ترتیب در هنگام استفاده از پیک ۱۰۰ کریستالیت‌های چهار وجهی و هشت وجهی استفاده می‌شود و این دو مقدار به عنوان حدود بالا و پایین برای این پارامتر در نظر گرفته می‌شود.

λ : طول موج تیوب تولیدکننده پرتو ایکس (برحسب نانومتر) (اگر از تشعشع K_{α} مس استفاده شده باشد، ۰/۱۵۴ نانومتر)

β : پهنای پیک در نصف ارتفاع بیشینه (FWHM) (برحسب درجه که باید به واحد طول تبدیل شود).

θ : زاویه پراش (برحسب درجه)

می‌باشند. برای استفاده از این فرمول باید داده‌های λ ، β و θ را پس از انجام آزمایش از آزمایشگاه اشعه ایکس (XRD) گرفت.

توجه: در رابطه شرر K و $\cos\theta$ بدون دیمانسیون هستند و دیمانسیون β ، λ و τ نیز باید از یک جنس (واحد طول) باشد. برای تبدیل دیمانسیون β از درجه به رادیان از فرمول زیر استفاده می‌شود:

$$\frac{\beta \times 3.1416}{180}$$

تهیه‌کننده: آزمایشگاه اشعه ایکس دانشکده مهندسی معدن (دکتر گلناز جوزانی کهن)



مثال: مطلوب است تعیین اندازه کریستالیت کروی که در سیستم کوئیک متبلور می شود با داده های زیر:

$$K = 0.94$$

$$\lambda = 0.154 \text{ nm}$$

$$\beta = 0.5^\circ$$

$$2\theta = 27^\circ \rightarrow \theta = 13.5^\circ$$

$$\tau = \frac{0.94 \times 0.154}{\frac{0.5 \times 3.1416}{180} \times \cos 13.5} = 27.88 \text{ nm}$$



تهیه کننده: آزمایشگاه اشعه ایکس دانشکده مهندسی معدن (دکتر گلناز جوزانی کهن)

