

ISSN: 2821-157X		https://www.jasd.khadu.ir	
	Journal of Aerospace Defense Volume 4 Issue 1 Spring 2026 Pages 84-98		
Research Paper 			
Modeling and x-ray diffraction pattern simulation of ZnSe quantum dots			
Zahedeh Kazemi¹, Masoud Rezvani Jalal^{*2}, Dariush Souri^{*3} 1. PhD. Student, Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Hamedan, Iran. Email: z.kazemi2014@gmail.com 2. Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Hamedan, Iran. Email: rezvanijalal@gmail.com & rezvanijalal@malayeru.ac.ir 3. Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Hamedan, Iran., Email: d.souri@gmail.com & d.souri@malayeru.ac.ir			
Article Information		Abstract	
Accepted: 2026/06/20 Received: 2026/01/04 Keywords:	Abstract Introduction: In the present work, the X-ray diffraction (XRD) pattern of ZnSe quantum dots is simulated using a home-made computer program. ZnSe is an important semiconductor with an FCC-zinc blend stable crystalline phase owing a lattice constant of 5.6676 Å, which has widespread applications in optoelectronics, infrared detectors, and aerospace technology applications. Methods: In this study, XRD patterns are simulated for both bulk and nanoscale ZnSe. Findings: The results indicate that in the bulk phase, the diffraction peaks are very sharp and narrow, consistent with the standard reference cards. However, at the nanoscale, the peaks broaden and their intensity changes, indicating a reduction in crystallite size and an increase in structural defects. A comparison is made between the simulation and the experimental results, showing that the agreement between the experimental XRD pattern and the simulated one in terms of the number of peaks, their positions, relative intensities, and peak widths indicates good consistency. Conclusion: This research confirms that XRD simulation is a powerful and efficient tool for the structural analysis of nanomaterials, capable of accurately reproducing the effects of size and defects on diffraction patterns. Therefore, the developed program can play a significant role in the analysis and design of ZnSe semiconductor nanostructures and other compounds.		
Crystallite, Crystal structure of ZnSe, X-ray Diffraction (XRD) simulation, Bragg's formula, Quantum dots.			
Corresponding Authors: Masoud Rezvani Jalal Email: rezvanijalal@gmail.com rezvanijalal@malayeru.ac.ir Dariush Souri Email: d.souri@gmail.com d.souri@malayeru.ac.ir			
Zahedeh Kazemi¹, Masoud Rezvani Jalal[*], Dariush Souri[*], Modeling and x-ray diffraction pattern simulation of ZnSe quantum dots. Aerospace Defense, Vol 1 (Issue5), Page 84-98			



فصلنامه علمی دفاع هوافضایی

دوره ۵ شماره ۱

بهار ۱۴۰۵

صفحات ۹۸ - ۸۴



مقاله پژوهشی

مدل زنی و شبیه سازی الگوی پراش پرتو ایکس مربوط به نقاط کوانتومی

ZnSe

زاهده کاظمی^۱، مسعود رضوانی جلال^{۲*}، داریوش سوری^{۳*}

۱. دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه ملایر، همدان، ایران. Email: z.kazemi2014@gmail.com

۲. استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه ملایر، همدان، ایران. Email: rezvanirezvanijalal@gmail.com & rezvanijalal@malayeru.ac.ir

۳. استاد، گروه فیزیک، دانشگاه ملایر، همدان، ایران. Email: d.souri@gmail.com & d.souri@malayeru.ac.ir

چکیده

اطلاعات مقاله

چکیده

مقدمه: در کار حاضر، شبیه سازی الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) مربوط به نقاط کوانتومی ZnSe با استفاده از یک کد محاسباتی توسعه یافته انجام می شود. ZnSe یک نیم رسانای مهم دارای فاز بلوری پایدار با ساختار مکعبی مرکز وجهی و ثابت شبکه ۰.۶۶۷۶ آنگستروم است که در حوزه های اپتوالکترونیک، آشکارسازهای فروسرخ و فناوری های هوا فضایی نیز کاربردهای فراوانی دارد.

روش: در این کار پژوهشی، الگوی پراش پرتو ایکس برای دو حالت کُپه ای و نانومقیاس ZnSe شبیه سازی می گردد.

یافته ها: از نتایج چنین برمی آید که در حالت کپه ای قله های پراش کاملاً تیز و باریک هستند که با جدول ها و کارت های استاندارد همخوانی دارد. با این حال، در ابعاد نانو قله ها پهن تر شده و شدت آنها نیز کم و زیاد می شود که نشان دهنده کاهش اندازه بلورک و افزایش نقص های ساختاری است. مقایسه ای بین شبیه سازی و نیز نتایج تجربی انجام می شود که از تطابق بین XRD تجربی و شبیه سازی از بابت تعداد قله ها، مکان آنها، نسبت شدت ها و پهنای قله ها نشانگر یک مطابقت خوب می باشد.

نتیجه گیری: پژوهش پیش رو مؤید این مطلب است که شبیه سازی XRD ابزار قدرتمند و کارآمدی برای تحلیل ساختاری نانو مواد است که می تواند اثرات اندازه و نقص را بر الگوهای پراش به دقت بازتولید کند. لذا برنامه ی توسعه یافته قادر است در تحلیل و طراحی نانو ساختارهای نیم رسانای ZnSe و ترکیبات دیگر کاربرد مهمی داشته باشد.

تاریخ دریافت:

۱۴۰۴/۱۰/۱۴

تاریخ پذیرش:

۱۴۰۵/۰۳/۳۰

کلیدواژه ها:

بلورک، ساختار بلوری ZnSe، شبیه سازی پراش پرتو ایکس، فرمول براگ، نقاط کوانتومی.

نویسندگان مسئول:

مسعود رضوانی جلال

ایمیل:

rezvanijalal@gmail.com

rezvanijalal@malayeru.ac.ir

داریوش سوری

ایمیل:

d.souri@gmail.com

d.souri@malayeru.ac.ir

استناد: زاهده کاظمی، مسعود رضوانی جلال، داریوش سوری تحلیل کماتش برشی ورق های کامپوزیتی چندلایه حاوی ترک های ماتریسی با رویکرد ترکیبی تئوری تغییر شکل برشی مرتبه بالا و مدل آسیب تجربی. مجله دفاع هوافضایی، دوره ۵ (شماره ۱)، صفحه ۹۸-۸۴.

۱- مقدمه

پراش پرتو ایکس (XRD)^۱ یکی از قدرتمندترین روش‌های تحلیلی است که اطلاعات کیفی و کمی درباره ساختار بلوری و ترکیب ماده فراهم می‌کند. اندازه‌گیری فاصله‌ی میانگین بین صفحات شبکه‌ای، تعیین جهت‌گیری تک‌بلورها یا دانه‌های بلوری، شناسایی ساختار بلوری مواد ناشناخته، تعیین پارامترهای شبکه‌ای، شکل هندسی و کرنش شبکه‌ای از کاربردهای این روش آنالیزی است [۱ و ۲]. پراش پرتو ایکس در حوزه‌های مختلفی مانند مهندسی مواد، زمین‌شناسی و محیط زیست کاربرد دارد. XRD بر پایه پراش پرتو ایکس از صفحات بلوری ماده انجام می‌شود و نتیجه آن به صورت الگوی شدت پراش نسبت به زاویه پراش ثبت می‌گردد. هر بلور الگوی منحصر به فردی دارد که به عنوان اثر انگشت ماده شناخته می‌شود. تحلیل الگوهای پراش برای تعیین فازهای ماده، فرآیندی دشوار و دارای محاسباتی پیچیده است؛ به ویژه زمانی که نمونه دارای چندین فاز باشد [۱]. پراش پرتو ایکس از گذشته برای تعیین ساختمان اتمی مواد بلوری به کار رفته است. این روش بر این اصل استوار است که طول موج پرتو ایکس قابل مقایسه با فواصل میان اتم‌های موجود در ماده است. وقتی ماده‌ای که ساختمان اتمی آن دارای نظم دوره‌ای بلندبرد است تحت تابش پرتو ایکس قرار می‌گیرد الگوی پراشی شامل قله‌های تیز و واضح به نام قله‌های براگ تولید می‌کند. با اندازه‌گیری موقعیت زاویه‌ای و شدت این قله‌ها می‌توان ویژگی‌های فضایی و تقارن‌های ساختار بلوری (یعنی ترتیب سه‌بعدی اتم‌ها در ماده بلوری) را مشخص کرد [۳]. هنگامی که اندازه بلورک از ابعاد گُپه‌ای به ابعاد نانو کاهش می‌یابد، قله‌های XRD دستخوش پهن‌شدگی می‌شوند [۴]. این پدیده می‌تواند ناشی از کوچک شدن اندازه و همچنین نقایص ساختاری و کرنش شبکه‌ای باشد [۵ و ۶]. با وجود اهمیت تحلیل خطوط پراش پرتو ایکس و عمومی بودن کارایی آن، اطلاعات موجود در داده‌های XRD برای مواد نانومقیاس همیشه به طور کامل استخراج نمی‌شود و حتی در برخی موارد نیز به اشتباه تفسیر می‌گردند [۴]. تاکنون روش‌های متنوعی برای تحلیل الگوی XRD ارائه شده است که برای نانومواد مختلفی مورد استفاده قرار گرفته‌اند. یکی از بهترین روش‌ها برای این کار، استفاده از محاسبات عددی و شبیه‌سازی است. با انجام شبیه‌سازی XRD با تکیه بر مدل‌های صحیح فیزیکی می‌توان اطلاعات ارزشمندی از ساختار نانوذرات به دست آورد. یکی از مزایای شبیه‌سازی XRD نانوذرات بلوری این است که بدون نیاز به انجام آزمایش‌های پرهزینه و زمان‌بر می‌توان اطلاعات ارزشمندی به دست دهد. اساسی‌ترین فرمول شبیه‌سازی XRD رابطه معروف براگ است که به شکل $2d\sin(\theta) = m\lambda$ می‌باشد و قابل استفاده در برنامه‌های شبیه‌سازی نیز هست. این رابطه فقط قابل اعمال به بلورهای کامل (یعنی بدون نقص) است و دارای برخی محدودیت‌ها همچون نیاز به اطلاعاتی از صفحات بازتابنده مورد نظر و فاصله بین آنها می‌باشد. از سایر

^۱ X-Ray Diffraction

فرمول بندی های معروف، می توان فرمول شرر را ذکر کرد. این روش برای تعیین اندازه بلورک ها با فرمولی به صورت $D = K \lambda / \beta \cos(\theta)$ است که در آن λ طول موج پرتو ایکس، β پهنای کل قله پراش در نیم بیشینه شدت و θ زاویه پراش می باشند. K نیز عامل شکل ذرات می باشد که برای نانوذرات کروی مساوی ۰/۸۹ است [۲]. رابطه شرر از این بابت که از الگوی تجربی XRD استفاده می کند ولی نمی تواند موقعیت زوایای پراش و شدت قله ها را بیابد محدود است. همه این محدودیت ها در تقریب هایی نهفته است که این فرمول بندی ها با آنها به دست آمده اند و با کاهش یا حذف تقریب ها می توان به دقت های بالایی دست یافت. فرمول بندی ذکر شده در مقاله حاضر از این بابت که از فرمول دقیق و مستقیم پراش استفاده می کند یک نوآوری می باشد که بدون هیچ تقریبی اقدام به شبیه سازی XRD می نماید.

پژوهشگران در حوزه نانو فناوری بیش از پیش به مطالعه ویژگی نانو ساختارهای مبتنی بر نیم رساناهای BII-VIA علاقه مند شده اند، زیرا این مواد در توسعه ادوات اپتوالکترونیکی و هوافضایی جدید کاربرد دارند. این ترکیبات از نظر فناوری بسیار مهم بوده و در کاربردهای متعددی به کار می روند؛ مانند حافظه های نوری، ادوات لیزر نیم رسانا، نورتابی، آشکارسازهای نوری شفاف، نمایشگرهای تصویری، سلول های خورشیدی، فوتودیودهای فرا بنفش، دوربین های فروسرخ پیشنگر (forward looking) جهت استفاده در صنعت هواپیمایی و ... [۷]. اخیراً نانوذرات سلنید روی (ZnSe) به دلیل کاربردهای بالقوه ای که از ویژگی های فیزیکی و شیمیایی منحصر به فرد آن ناشی می شود، توجه بسیار ویژه ای را به خود جلب کرده است. این ویژگی ها شامل گاف انرژی بزرگ با گذار مستقیم، جذب نوری پایین در ناحیه مرئی، ضریب شکست مطلوب، رسانایی الکتریکی زیاد، فعالیت ضد باکتری، فعالیت فوتوکاتالیستی زیاد و سازگاری با محیط زیست می باشند [۸]. مقالات زیادی در مراجع وجود دارد که به سنتز این ماده و نیز مشخصه یابی آن پرداخته است [۸-۱۰]. البته در ارتباط با حسگرها می توان گفت که شبیه سازی دقیق ویژگی های فیزیکی و ساختاری ZnSe می تواند به طراحی بهتر و دقیق تر آشکارسازهای فروسرخ جهت کاربردهای نظارتی و دفاعی در فناوری های هوافضا کمک کند. آنچه که در این مقالات کمبود آن احساس می شود، شبیه سازی مشخصات فیزیکی و مقایسه ای آنها با داده های تجربی و صحت سنجی نتایج می باشد. تعداد محدودی کار محاسباتی در خصوص نانوذرات و نقاط کوانتومی ZnSe در مراجع وجود دارد که با روش عددی ریتوالد به شبیه سازی XRD پرداخته اند [۱۱-۱۳]. باید دقت داشت که روش ریتوالد در واقع یک الگوریتم برازشی بر اساس داده های تجربی است و یک روش محاسباتی پایه ای برای شبیه سازی XRD نیست. مقاله حاضر از این بابت که با فرمول پایه ای پراش به شبیه سازی XRD می پردازد با چنین روش های برازشی تفاوت اساسی دارد.

در کار حاضر، به شبیه سازی الگوی پراش XRD مربوط به نقاط کوانتومی ZnSe با ابعاد زیر سه نانومتر پرداخته می شود و نتایج حاصل مورد بحث و بررسی قرار می گیرد. ابتدا ساختار بلوری ZnSe ذکر می گردد. سپس، الگوریتم شبیه سازی پراش پرتو ایکس آورده می شود. در ادامه نیز نتایج شبیه سازی ارائه می گردد. انتهای مقاله نیز شامل جمع بندی و نتیجه گیری می باشد.

۲- ساختار بلور ZnSe

همانطور که در مقالات گزارش شده است، ZnSe می‌تواند در فازهای مختلف بلوری مثل زینک بلند^۱ یا وُرْتزایت^۲ تشکیل شود [۵]. فاز زینک بلند پایدارترین فاز در شرایط دمای اتاق و فشار معمولی است و چون انرژی آزاد برای تشکیل آن کمتر است از نظر ترمودینامیکی ترجیح بیشتری برای تشکیل دارد. در مقاله حاضر، همین ساختار بلوری مورد تمرکز قرار می‌گیرد. ترکیب ZnSe در فاز زینک بلند دارای ساختار مکعبی مرکز وجهی (FCC) است و هر سلول واحد شبکه شامل چهار مولکول می‌باشد. ثابت شبکه این بلور برابر با ۵/۶۶۷۶ آنگستروم است. این ساختار بلوری متعلق به گروه فضایی $F\bar{4}3m$ با شماره ۲۱۶ می‌باشد. در این ساختار، کاتیون‌های روی (Zn^{+2}) در موقعیت‌های گوشه‌ای و لبه‌های وجوه قرار دارند. همچنین آنیون‌های سلینیوم (Se^{-2}) یک شبکه مکعبی مرکوزوجهی تشکیل می‌دهند که به اندازه یک چهارم قطر اصلی در امتداد قطر جابه‌جایی دارند. بدین ترتیب، کل ساختار را می‌توان به صورت یک شبکه الماسی دو جزئی در نظر گرفت که فاقد تقارن وارونگی^۳ است [۷]. در این آرایش چهار کاتیون روی در جایگاه‌های وایکوف با مختصات معادل (۰،۰،۰) توزیع شده‌اند، در حالی که چهار آنیون سلینیوم در جایگاه‌های وایکوف با مختصات معادل (۱/۴، ۱/۴، ۱/۴) قرار گرفته‌اند [۱۴]. این بلور همچنین دارای شماره کارت ۲۳۴۵-JCPDS=۸۸ است [۱۵]. مختصات اتم‌ها در داخل سلول واحد شبکه به صورت زیر بیان می‌شود:

$$(0,0,0) \text{ و } (0, 1/2, 1/2) \text{ و } (1/2, 0, 1/2) \text{ و } (1/2, 1/2, 0) \quad (۱)$$

و اتم‌های Se [۱۶]:

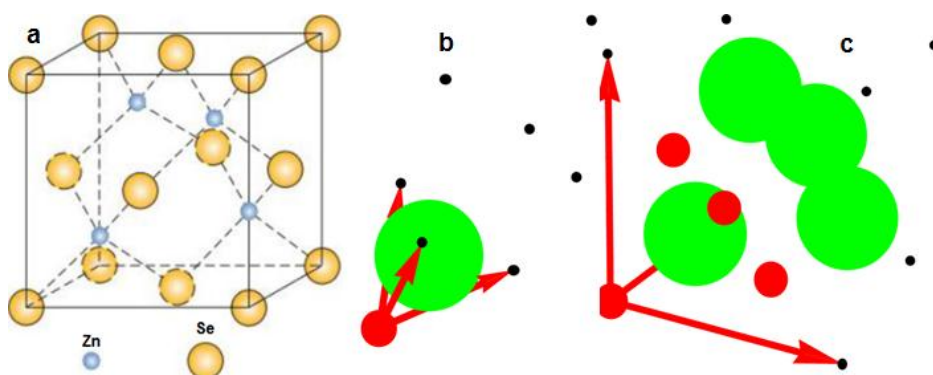
$$(1/4, 1/4, 1/4) \text{ و } (1/4, 3/4, 3/4) \text{ و } (3/4, 1/4, 3/4) \text{ و } (3/4, 3/4, 1/4) \quad (۲)$$

در شکل ۱-a ساختار زینک بلند با لحاظ کردن همه‌ی اتم‌های یک سلول مکعبی آورده شده است. طرحواره‌ای از سلول واحد شبکه بلور سلینید روی نیز که در برگزیده‌ی ۴ مولکول ZnSe می‌باشد در شکل ۱-C آورده شده است:

^۱ cubic zinc blend

^۲ hexagonal wurtzite

^۳ Inversion symmetry



شکل ۱: (a) ساختار زینک سلنید با لحاظ کردن همه اتم‌های یک سلول مکعبی در ZnSe. (b) طرحواره‌ای از سلول بسیط شبکه ZnSe که شامل فقط یک یون Zn^{+2} و یک یون Se^{-2} است که طبق مکان‌های وایکوف توزیع شده‌اند. (c) طرحی از سلول قراردادی شبکه بلور ZnSe که شامل ۴ یون Zn^{+2} و ۴ یون Se^{-2} طبق روابط (۱) و (۲) می‌باشد.

البته همانطور که گفته شد این شکل مربوط به سلول قراردادی می‌باشد. می‌توان سلول بسیط را نیز مد نظر قرارداد. شکل ۱-b نیز طرحواره‌ای از این سلول را نشان می‌دهد که یون‌ها طبق مکان‌های وایکوف در آن واقع شده‌اند. حال با در دست داشتن ساختار بلوری ZnSe و نظر به اهمیت شبیه‌سازی پراش پرتو ایکس که در بخش ۱ (مقدمه) مطرح شد، در بخش‌های بعدی به شبیه‌سازی XRD آن و نانوذرات مرتبط به آن پرداخته می‌شود.

۳- مدل زنی و شبیه‌سازی پراش پرتو ایکس

به طور کلی، دو حالت اصلی برای پراکندگی و پراش پرتو ایکس در مواجهه با اتم‌های مواد وجود دارد: (۱) پراکندگی توسط اتم‌های چیده شده به شکل تصادفی (مانند یک گاز تک اتمی)، که در این حالت پراکندگی در تمامی جهات رخ داده و ضعیف است و شدت‌ها به صورت اسکالر با هم جمع می‌شوند؛ (۲) پراکندگی توسط اتم‌های چیده شده به صورت دوره‌ای (مانند یک بلور کامل) که در این حالت در جهات محدودی که قانون براگ برقرار است، پراکندگی قوی بوده و پدیده‌ی پراش رخ می‌دهد. در سایر جهات، پرتوهای پراکنده تداخل سازنده ندارند و پراکندگی قابل توجهی مشاهده نمی‌شود [۱۷]. در مدل زنی و شبیه‌سازی پراش پرتو XRD باید از فرمول‌بندی‌های استاندارد استفاده کرد. پراش پرتو ایکس توسط بلورها بر اساس قانون براگ انجام می‌گیرد که به صورت زیر بیان می‌شود:

$$2d_{hkl} \sin(\theta_{hkl}) = n\lambda \quad (3)$$

که در آن n یک عدد صحیح، λ طول موج پرتو ایکس فرودی بر نمونه، d_{hkl} فاصله صفحات بلوری و θ_{hkl} نیز زاویه پراش مربوطه می‌باشد. برای بررسی دقیق‌تر لازم است که فرمول‌بندی کلی‌تری مطرح گردد. اگر فرض شود که بلور مورد بررسی یک بلور کامل است، آنگاه فرمول پراش ساده‌تر

می‌شود. اگر بردار انتشار پرتو $\vec{k}$ بردار انتشار پرتوی پراکنده شده $\vec{k'}$ و بردار شبکه وارون نیز $\vec{G}$ باشد آنگاه فرمول پراش به شکل رابطه ۴ در خواهد آمد. این فرمول‌بندی در واقع شرط لاهه است که معادل ریاضی قانون براگ می‌باشد:

$$\vec{k} - \vec{k'} = \vec{G} \quad (۴)$$

به عبارت دیگر، با داشتن بردارهای شبکه وارون و معلوم بودن جهت پرتو ایکس فرودی می‌توان تمام $\vec{k'}$ هایی که شرط فوق را برآورده می‌کنند پیدا کرد. جهت این $\vec{k'}$ ها در واقع همان موقعیت فضایی قله‌های پراش را نشان خواهد داد. برای یک بلور کامل این قله‌ها کاملاً تیز و باریک هستند. حال اگر بلوری که مورد مطالعه قرار دارد دارای نقایص بلوری باشد (مثلاً ابعاد آن محدود باشد و نقش اتم‌های واقع در سطح پر رنگ تر شود)، آنگاه فرمول (۴) در عین حالی که تقریب بسیار خوبی است ولی جامع نخواهد بود. در ابعاد نانومتری که شامل فقط تعداد معدودی از سلول واحد شبکه است، اعتبار رابطه‌ی (۴) باز هم کمتر می‌شود؛ برای مثال قله‌های تیز و باریک پراشی دیده نخواهد شد و پهن‌شدگی پیش خواهد آمد و حتی ممکن است که ارتفاع قله‌های پراشی نیز تغییر کند [۵۰]. این بدان معناست که فرمول‌بندی XRD در ابعاد ریز بلوری و مخصوصاً در قلمرو نانو از رابطه (۴) انحراف دارد. متأسفانه در این خصوص فرمول‌بندی صریح و یکتایی وجود ندارد و باید به روش‌های محاسباتی روی آورد. برای انجام این کار لازم است که جایگاه‌های اتمی در داخل سلول واحد شبکه معلوم باشد. اگر برای مثال N اتم در هر یاخته بسیط وجود داشته باشد و مکان هر اتم نیز با $\vec{r}_n$ مشخص شود، آنگاه دامنه تداخلی پرتوی ایکس فرودی به این اتم‌ها (با بردار انتشار $\vec{k}$) و پرتوهای پراکنده شده از آنها (با بردار انتشار $\vec{k'}$) به صورت رابطه ۵ خواهد بود:

$$E = \sum_{n=1}^N e^{i(\vec{k}-\vec{k'}) \cdot \vec{r}_n} \quad (۵)$$

این دامنه تداخلی مربوط به یک سلول شبکه است و اگر چندین سلول وجود داشته باشد آنگاه با جمع همه آنها به راحتی می‌توان شدت پراش بر حسب زاویه پراکندگی و قله‌های پراشی را پیدا کرد. برنامه‌ای توسط نویسندگان کار حاضر در محیط ممتیکا توسعه داده شده است که برای بلور مورد نظر ابتدا جایگاه‌های اتمی در سلول واحد شبکه (مکان‌های وایکوف)، ثابت شبکه و بردارهای انتقال را دریافت می‌کند. پرتو ایکس نیز از هدف مس با طول موج $\lambda_{\text{Cu:K}\alpha} = 1.54178 \text{ \AA}$ انتخاب می‌گردد. سپس، بردارهای وارون شبکه ساخته می‌شوند و با کمک رابطه (۴) با ثابت نگه داشتن $\vec{k}$ به دنبال تمام $\vec{k'}$ هایی گشته می‌شود که شرط براگ را برآورده کنند. این جهات در واقع همان راستاهای پراش و قله‌های پراشی حالت کپه‌ای می‌باشند. برای شبیه‌سازی نانوبلورها، با توجه به اینکه سلول واحد شبکه به شکل مکعب مربع با ضلع $5.6676 \text{ \AA}$ آنگستروم است ذرات بزرگ‌تر نیز به صورت مکعبی با ابعاد دلخواه (البته مضربی از سلول واحد شبکه) ساخته می‌شوند. می‌توان بعضی از یون‌ها را در ساختار نانوذره حذف کرد و نواقص بلوری را نیز مورد بررسی قرار داد که در مقاله حاضر چنین هدفی مد نظر نبوده است. در ادامه، برنامه کامپیوتری مذکور، بسته به ابعاد بلورک و اینکه چند سلول شبکه

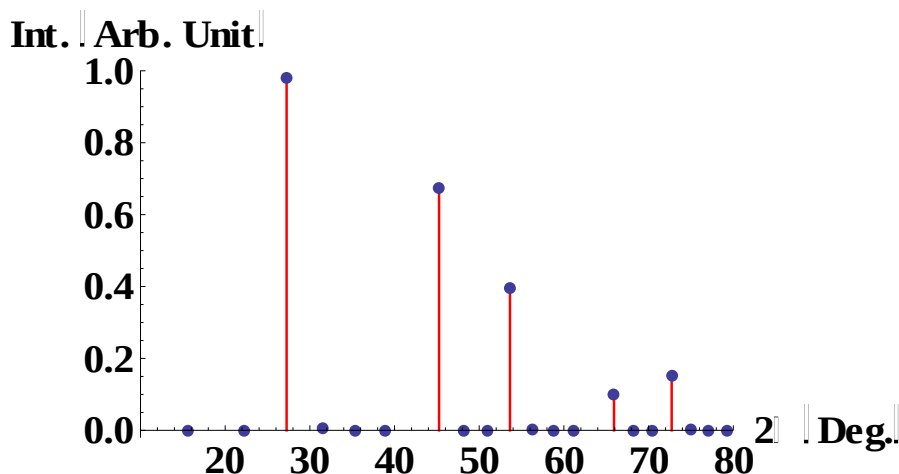
را در خود جای داده است حاصل جمع رابطه (۵) را محاسبه کرده و در نهایت نیز توزیع زاویه ای شدت پراکندگی (یا همان پراش) را به دست می دهد. برای انجام این کار، باز هم راستای فرود پرتو ایکس (یعنی $\vec{k}$) را ثابت نگه می دارد و تمام راستاهای پراکندگی $\vec{k'}$ را در سیستم مختصات کروی در نظر می گیرد و دامنه پراشی را حساب می کند. سپس، جهت فرود پرتو ایکس را تغییر داده و مجدداً شدت پراش را برای تمام جهات پراکندگی محاسبه می نماید. این کار را آنقدر تکرار می کند تا تمام راستاهای فرودی و تمام راستاهای پراکندگی (البته با تعداد گسسته سازی مناسب) پوشش داده شوند. در نهایت نیز همه شدت های یافته شده در یک جهت پراکندگی دلخواه را با هم جمع کرده و نمودار شدت را بر حسب زاویه پراکندگی (یا همان 2θ) ترسیم می کند و الگوی XRD را به دست می دهد. با این کار، انگار بلورک مورد نظر از تمامی جهات تحت تابش قرار دارد و پراش آن نیز در همه جهات مورد نظر قرار می گیرد. چالشی که برای محاسبات در این الگوریتم وجود دارد این است که با افزایش ابعاد بلور، تعداد جملات درون رابطه (۵) به صورت تصاعدی (متناسب با مکعب اندازه بلور) افزایش پیدا می کند. این موضوع باعث می گردد که زمان اجرای محاسبات بسیار طولانی شود. برای پرهیز از این اتفاق، تناوب های بزرگ تری از ساختار بلور (غیر از ریزترین تناوب که همان سلول واحد است) انتخاب می شوند که می توان آن را یکی دیگر از نوآوری کار حاضر در محاسبات تلقی کرد. می توان میانگین گیری کاملاً دقیقی بر روی فرمول (۵) نسبت به تمام جهت گیری های فضایی بلور انجام داد و به یک رابطه مناسب تری رسید:

$$I(2\theta) = [1 + \cos(2\theta)]^2 \sum_{m,n} \frac{\sin(2kr_{mn} \sin(\theta))}{2kr_{mn} \sin(\theta)} \quad (۶)$$

رابطه فوق به فرمول پراش دبای معروف است و نقش مهمی در شبیه سازی XRD نانوذرات ایفا می کند [۱۸]. منظور از r_{mn} در رابطه (۶) فاصله بین اتم m و اتم n در داخل بلورک است. در ادامه به ذکر نتایج شبیه سازی با استفاده از فرمول بندی های فوق پرداخته می شود.

۴- شبیه سازی و نتایج محاسبات

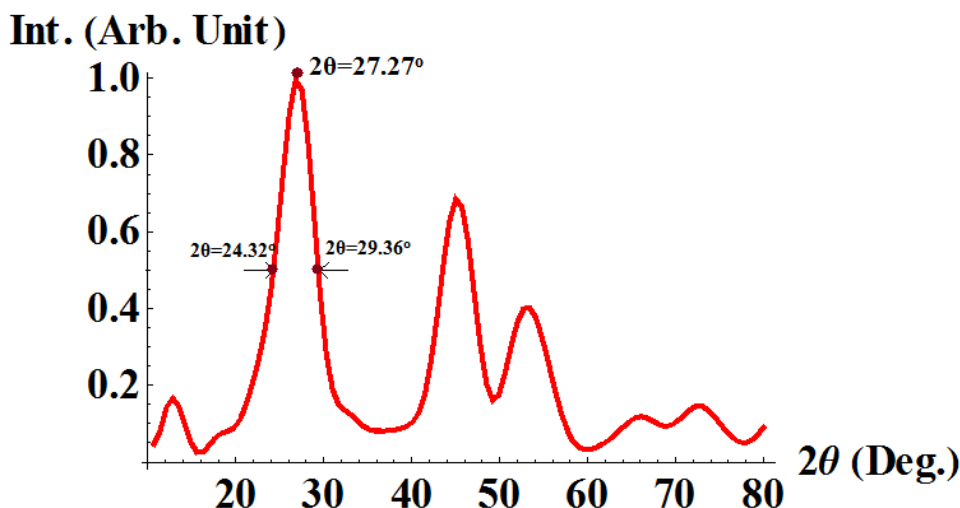
همانطور که قبلاً نیز گفته شد، بلور ZnSe دارای ساختار مکعبی مرکز وجهی با ثابت شبکه ۵/۶۶۷۶ آنگستروم است [۷] و در هر سلول واحد شبکه ۴ مولکول ZnSe قرار دارد. با وارد کردن مشخصات این بلور در برنامه رایانه ای مذکور، می توان الگوی XRD را شبیه سازی کرد. در شکل ۲ الگوی پراش مربوط به ZnSe با ساختار کپه ای ایده آل و بدون نقص که توسط برنامه مورد نظر شبیه سازی شده آورده شده است. شدیدترین قله در $2\theta = 27.27^\circ$ قرار دارد که مربوط به بازتاب از صفحات بلوری (1,1,1) است. همانطور که واضح است قله ها بسیار تیز و جدا از هم هستند. این نمودار نمایانگر پراش بلور ایده آل (تک بلور فاقد نقص با ابعاد بسیار بزرگ) است.



شکل ۲: الگوی پراش XRD شبیه‌سازی شده برای بلور ZnSe کپه‌ای توسط برنامه نوشته شده.

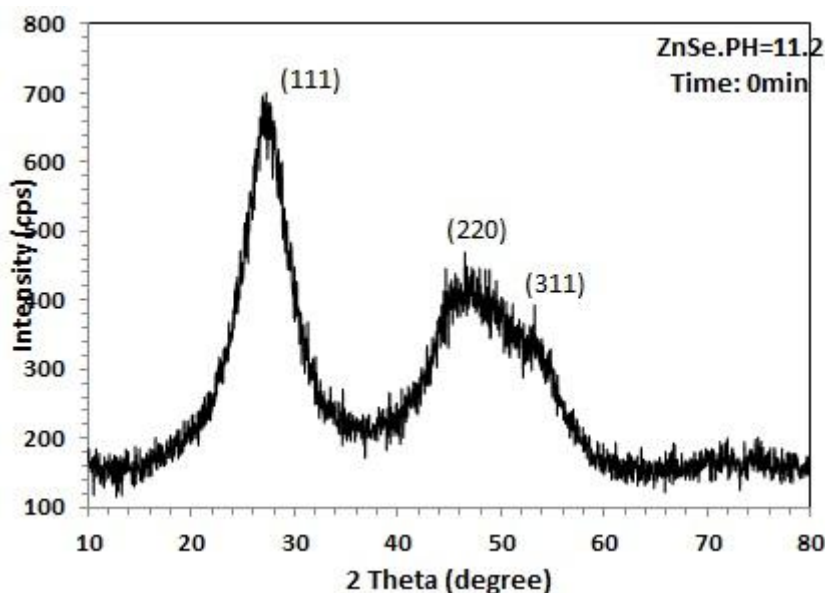
مقایسه نمودار فوق با الگوهای استاندارد نشان می‌دهد که الگوی شبیه‌سازی شده کاملاً با شماره کارت JCPDS= ۸۸-۲۳۴۵ همخوانی دارد و به گروه فضایی $F\bar{4}3m$ با شماره ۲۱۶ متعلق است [۷ و ۱۵].

در شکل ۳ نیز الگوی پراش نانو بلورهای ZnSe با ابعاد دو نانومتر (یا به طور دقیق‌تر مکعبی به ضلع 1.7 nm که از نظر حجمی معادل کره‌ای به قطر 2.11 nm است) که توسط برنامه مورد نظر شبیه‌سازی شده است آورده شده است. با توجه به اینکه سلول واحد این بلور دارای شکل مکعبی است نانوذره ساخته شده برای محاسبات فوق نیز به شکل مکعبی انتخاب گردیده است. از این الگو و مقایسه آن با شکل ۲ کاملاً مشخص است که قله‌ها پهن‌تر هستند و پراکندگی شدت پس‌زمینه نیز بیشتر شده است. علت اصلی پهن‌شدگی قله‌های پراشی و تغییرات در شدت نسبی آنها ناشی از نقایص بلوری است. اصلی‌ترین نقص بلوری که در اینجا وجود دارد نقص سطحی است که از پراش اتم‌های سطحی نشأت می‌گیرد. هرچقدر نسبت اتم‌های سطحی به اتم‌های حجمی بیشتر باشد این پهن‌شدگی نیز افزایش می‌یابد و حوزه نانومقیاس که افزایش نسبت سطح به حجم یکی از علت‌های اصلی بروز ویژگی‌های فیزیکی جالب است پهن‌شدگی را نیز به شدت تحت تاثیر قرار می‌دهد. این موضوع بیانگر تاثیر کاهش اندازه دانه بلوری بر پهن‌شدگی قله‌ها به دلیل اثر اندازه کوچک و نیز نقص‌های بلوری است. همانطور که از روی شکل هم مشخص شده است شاخص‌ترین قله در $2\theta = 27.27^\circ$ قرار دارد. پهنای کامل در نیم بیشینه ارتفاع قله (یا FWHM) نیز برطبق زوایای مشخص شده روی نمودار برابر با $\Delta 2\theta = 5.04^\circ$ است. نسبت بین شدت دو قله مرتفع (یعنی قله اصلی و قله واقع در $2\theta = 45.25^\circ$) نیز حدود 0.7 می‌باشد.



شکل ۳: الگوی پراش XRD شبیه‌سازی شده برای ZnSe با ابعاد دو نانومتر توسط کد رایانه ای نوشته شده توسط نویسندگان مقاله.

در شکل ۴ نیز الگوی پراش مربوط به ZnSe حاصل از کار تجربی با ابعاد حدود دو نانومتر آورده شده است [۵] که در ادامه، اندازه‌ی نانو بلورک با رابطه‌ی شرر تعیین خواهد شد. این الگو دارای شدت‌های نسبتاً بالا در قله‌های (۱۱۱)، (۲۲۰)، (۳۱۱) بوده و پهنای قله‌ها (به‌ویژه قله اصلی در حدود ۲۸ درجه) نسبتاً زیاد و حدود 7.1° است و نسبت بین شدت دو قله مرتفع نیز حدود ۰.۶۴ می‌باشد. همانطور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، پهن شدگی قله‌های پراش کاملاً مشهود است و موقعیت قله‌ها نیز در توافق بسیار خوبی با شبیه‌سازی انجام شده روی همین نمونه (شکل ۳) می‌باشند. این موضوع مؤید شبیه‌سازی موفق و قابل اتکای این ساختار است که قابل گسترش به ساختارهای دیگر نیز می‌باشد. البته تفاوت‌های اندکی نیز در مقایسه شکل ۳ با ۴ دیده می‌شود. برای مثال دو قله موجود در بین زاویه‌های ۴۰ تا ۶۰ درجه در الگوی شبیه‌سازی شده از هم جدا هستند ولی در الگوی تجربی با هم همپوشانی دارند. با توجه به اینکه شبیه‌سازی انجام شده کاملاً دقیق است می‌توان گفت که از بین‌رفتگی تیزی قله‌های مذکور در الگوی تجربی و همپوشانی ظاهری ایجاد شده بین آنها می‌تواند ناشی از خطاهای احتمالی تجربی موجود در دستگاه مخصوصاً قسمت آشکارساز آن بوده باشد.



شکل ۴: الگوی پراش XRD مربوط به ZnSe حاصل از کار تجربی [۵] با اندازه ۱/۹۸ نانومتر.

قابل ذکر است که وقتی اندازه بلورهای منفرد کمتر از حدود ۱۰۰۰ آنگستروم (۱۰۰ نانومتر) باشد، معمولاً از اصطلاح «اندازه ذره»^۱ استفاده می‌شود که صحیح نیست و اصطلاح «اندازه بلورک»^۲ بهتر است. بلورها در این محدوده اندازه، پهن‌شدگی در قله‌های پراش پرتو ایکس نشان می‌دهند که این پهن‌شدگی توسط رابطه شرر (رابطه ۷) داده می‌شود:

$$D_{hkl} = \frac{K\lambda}{\beta_{hkl} \cos \theta_{hkl}} \quad (7)$$

که در آن D_{hkl} اندازه بلورک، β_{hkl} عرض کامل قله‌های پراش در نیم بیشینه‌ی شدت خط پراش پهن‌شده بر حسب رادیان، λ طول موج پرتو ایکس فرودی بر نمونه و K عامل شکل ذره‌ی تشکیل شده توسط بلورکها است که برای نانوذرات کروی $K=0.89$ می‌باشد. لازم به ذکر است که شکل ذرات در مطالعات تجربی توسط میکروسکوپ الکترونی عبوری تعیین می‌گردد و تمامی خطوط پراش، حتی زمانی که اندازه بلورک از ۱۰۰۰ آنگستروم فراتر رود، به دلایلی مانند واگرایی پرتو فرودی و اندازه نمونه و قطر پرتو ایکس، عرض قابل اندازه‌گیری دارند. از این رو، منظور از β_{hkl} ، عرض اضافی یا پهن‌شدگی ناشی از اثر اندازه بلورک به تنهایی است. به عبارت دیگر، β_{hkl} اساساً زمانی که اندازه بلورک از حدود ۱۰۰۰ آنگستروم بیشتر شود، صفر است [۵ و ۱۹]. همانطور که ذکر شد با استفاده از فرمول شرر می‌توان اندازه نانوبلورک را به دست آورد. طبق این فرمول، اندازه نانو بلورک مربوط به

^۱ Particle size

^۲ Crystallite size

الگوی پراش شکل ۴ حدود ۱/۹۸ نانومتر به دست آمد که همخوانی بسیار خوبی با پیش بینی حاصل از شبیه سازی دارد.

بطور کلی، سه الگوی ارائه شده در شکل های ۲ و ۳ و ۴ که به ترتیب نشان دهنده الگوهای پراش XRD نمونه های ZnSe شبیه سازی شده در حالت کپه ای و نانومقیاس و نتیجه ای آزمایشگاهی نمونه ای سلنید روی سنتز شده به روش گرمایی می باشند به خوبی با هم سازگاری دارند. البته تفاوت هایی نیز بین آنها وجود دارد. چنین تفاوت هایی در شدت و موقعیت قله ها و پهنای آنها می تواند اطلاعات ارزشمندی درباره اندازه بلورک، نظم بلوری، و کیفیت نمونه ارائه دهند. در ادامه به بحث و بررسی نتایج به دست آمده پرداخته می شود.

۵- بحث و بررسی

نظر به استفاده از مدل کامل پراش پرتو ایکس (رابطه ی ۵) نتایج شبیه سازی نشان داد که بلور ZnSe با ساختار مکعبی مرکز وجهی در شرایط ایده آل و کپه ای الگویی از پراش پرتو ایکس ارائه می دهد که با داده های استاندارد کاملاً همخوانی دارد. تصویر شکل ۲ نشان دهنده الگوی پراش ایده آل است که تنها شامل قله های تیز و باریک در زوایای مشخص 20_{hkl} است. شدت ها به صورت خطوط باریک نمایش داده شده اند که همان موقعیت صفحات بلوری با شاخص های میلر مشخص (hkl) هستند. چون ساختار ZnSe مکعبی مرکز وجهی زینک بلند است، بازتاب ها فقط در جهاتی ظاهر می شوند که شرط انتخابی برآورده شود. قله ها بسیار تیزند که نشان دهنده ی عدم وجود کرنش یا نقص در بلور است.

در شکل ۳ (که شبیه سازی XRD نانوبلور سلنید روی با اندازه ی ۲ نانومتر است) قله ها دیگر به شکل خطوط تیز نیستند، بلکه به صورت قله های پهن ظاهر می شوند. علت این پدیده، قانون شرر است که نشان می دهد هر چه اندازه ی بلورک کوچک تر باشد، پهنای قله ها بیشتر می شود. با کاهش اندازه ذرات، علاوه بر پهن شدن قله ها، شدت نسبی آنها کاهش یافته و پس زمینه نیز بالاتر می رود. در نانومقیاس، تعداد صفحه های موازی بلوری کاهش یافته و نظم دوربرد از بین می رود. هرچه قله ها پهن تر و شدت آنها کمتر باشد، اندازه بلورک کوچک تر و نقص ساختاری بیشتر است. قله های باریک و منظم نشان دهنده کیفیت بلوری بالا و اندازه دانه درشت است. اختلاف بسیار جزئی و نامحسوسی در محل قله ها عمدتاً می تواند ناشی از پارامترهای شبکه ای و تاثیرات سطحی در اندازه های نانو، محدودیت کوانتومی و کرنش شبکه ای باشد. با این حال، هنگامی که ابعاد بلور به مقیاس نانومتری کاهش می یابد، تغییرات قابل توجهی در الگوی پراش مشاهده می شود. این پدیده نتیجه ی مستقیم کاهش تعداد صفحات بلوری شرکت کننده در پراش است که مطابق با معادله شرر پیش بینی می شود

در شکل ۴ که الگوی پراش تجربی برای نانو بلورهای ZnSe با اندازه ی ۱/۹۸ نانومتر ارائه شده است [۵]، همان روند شکل ۳ مشاهده می شود. قله های پراشی در مقایسه با بلور کامل پهن تر و دارای شدت کمتری هستند. این همخوانی بین نتایج شبیه سازی و آزمایش، اعتبار روش محاسباتی به کار رفته را تأیید می کند. تطابق بسیار خوب نتایج شبیه سازی با داده های تجربی موید این مطلب است که می توان یک پل ارتباطی قوی بین طراحی تجهیزات اپتوالکترونیکی پیشرفته دفاعی و طراحی

نرم افزارهای تخصصی شبیه سازی نانوساختار ایجاد کرد.

به طور کلی، مقایسه ی الگوهای شبیه سازی شده و تجربی نشان می دهد که (۱) شبیه سازی در ابعاد بزرگ قادر است الگوی پراش ایده آل را بازتولید کند که تطابق کامل با داده های استاندارد دارد، (۲) با کاهش ابعاد بلور به مقیاس نانو، تغییرات قابل توجهی شامل پهن شدگی و کاهش شدت قله ها رخ می دهد و (۳) الگوی به دست آمده از شبیه سازی در ابعاد ۲ نانومتر به خوبی با داده های تجربی تطابق دارد که نشان دهنده ی دقت مدل در بازتولید اثرات اندازه و نقایص بلوری است. بنابراین، می توان در نهایت نتیجه گرفت که برنامه ی توسعه داده شده توانایی مناسبی در بازسازی اثرات ساختاری و اندازه ای بر الگوهای XRD دارد و می تواند به عنوان ابزاری مؤثر در تحلیل مواد نانوبلوری مورد استفاده قرار گیرد. این موضوع با ایجاد امکان مطالعات ساختاری و اثر نقائص شبکه ای و کاهش اندازه ی بلور کها بر ویژگی هایی نظیر کرنش شبکه ای و چگالی نابه جایی های شبکه^۱، نتایجی را بدست می دهند که می تواند بسیار نزدیک به نتایج تجربی در آزمایشگاه باشد.

۶- جمع بندی و نتیجه گیری

در این مقاله الگوی پراش XRD نیم رسانای ZnSe هم در حالت کپه ای و هم در ابعاد نانو با اندازه ۲ نانومتر توسط یک کد محاسباتی توسعه یافته شبیه سازی گردید. در مجموع، نتایج این مطالعه نشان می دهد که شبیه سازی XRD می تواند به عنوان ابزاری قدرتمند و کارآمد برای تحلیل ساختاری نانومواد مورد استفاده قرار گیرد. این موضوع بیانگر آن است که شبیه سازی XRD می تواند به عنوان ابزاری مناسب برای تحلیل ساختاری نانومواد، بدون نیاز به آزمایش های پرهزینه و زمان بر، مورد استفاده قرار گیرد. کد شبیه سازی توسعه یافته می تواند در حوزه کنترل کیفیت به مهندسان و طراحان کمک کند تا با پیش بینی نقص های ساختاری بتوانند مواد نانو با کارایی بالاتر جهت کار در محیط های سخت (مانند شرایط جوی و فضایی) تولید کنند. به طور کلی، این پژوهش نشان داد که برنامه شبیه سازی ارائه شده توانایی بازتولید دقیق اثرات اندازه (و نیز کرنش و نقایص بلوری که البته در اینجا انجام نشده است) بر الگوهای پراش را دارد و می تواند در تحلیل و طراحی نانوساختارهای مبتنی بر نیم رساناهایی همچون ZnSe و ترکیبات مشابه در حوزه اپتوالکترونیک، نقش مؤثری ایفا کند.

۵- تشکر و قدردانی

از دانشگاه ملایر به خاطر حمایت از این کار پژوهشی تقدیر و تشکر می شود.

۶- تعارض منافع

نویسنده (گان) اعلام می دارند که در مورد انتشار این مقاله تضاد منافع وجود ندارد. علاوه بر این، موضوعات اخلاقی شامل سرقت ادبی، رضایت آگاهانه، سوء رفتار، جعل داده ها، انتشار و ارسال مجدد

^۱ Lattice dislocation density

و مکرر توسط نویسندگان رعایت شده است.

۷-دسترسی آزاد

این نشریه دارای دسترسی باز است و اجازه اشتراک (تکثیر و بازآرایی محتوا به هر شکل) و انطباق (بازترکیب، تغییر شکل و بازسازی بر اساس محتوا) را می دهد.

۸-منابع

- [1] Nikolaos I. Prasianakis. (2024). AI-enhanced X-ray diffraction analysis: towards real-time mineral phase identification and quantification. ISSN 2052-2525, 11, 647–648.
- [۲] Saeed Ebrahimi & Masoud Rezvani Jalal & Seyyede Fatemeh Hosseini. (2024). Optical, Structural and Mechanical Properties of Ag₂O₂/Ag₂CO₃ Nanocomposite Synthesized by Air-Plasma Electrolysis.
- [۳] Valeri Petkov. (2008). Nanostructure by high-energy X-ray diffraction. NOVEMBER, VOLUME 11, NUMBER 11, ISSN:1369 7021.
- [۴] Cameron F. Holder & Raymond E. Schaak. (2019). Tutorial on Powder X-ray Diffraction for Characterizing Nanoscale Materials. ACS Nano, 13, 7359–7365.
- [۵] Saeed Ebrahimi & Dariush Souri & Alireza Khezripour. (2022). Strain-size features of bare ZnSe:Cu and ZnSe:Cu@ZnS core/shell quantum dots from extensive X-ray diffraction analysis, and their photoluminescence properties. Journal of Luminescence 244 118757.
- [۶] K. Venkateswarlu & M. Sandhyarani & T.A. Nellaippan & N. Rameshbabu. (2014). Estimation of crystallite size, lattice strain and dislocation density of nanocrystalline carbonate substituted hydroxyapatite by X-ray peak variance analysis. Procedia Mater. Sci. 5, 212–221. [23] V. Soleimani, M.
- [۷] A. Rachidi & E. H. Atmani¹ & N. Fazouan & M. Boujnah. (2016). “A Study by *Ab-Initio* Calculation of Structural and Electronic Properties of Semiconductor Nanostructures Based on ZnSe, Materials Sciences and Applications. 7, 562-573.
- [۸] MF Hasaneen & ZA Alrowaili and WS Mohamed. (2020). Structure and optical properties of polycrystalline ZnSe thin films: validity of Swanepol's approach for calculating the optical parameters. Mater. Res. Express 7, 016422.
- [۹] Erfaneh Moghaddasi Nezhad & Dariush Souri & Ali Reza Soleymani & Ali Reza Khezripour. (2024). New insights into non-linear optical properties, photocatalytic activity, and applications of ZnSe:Cu nanoparticles prepared by

microwave-assisted hydrothermal method. Inorganic Chemistry Communications 169 113027.

[۱۰] Ali Reza Khezripour & Dariush Souri & Hadis Tavafi & Mehdi Ghabooli, (2019) Serial dilution bioassay for the detection of antibacterial potential of ZnSe quantum dots and their Fourier transform infra-red spectroscopy. Measurement 148,106939.

[۱۱] Saikat Chattopadhyay, Naveen V. Kulkarni & et al, (2011). Lattice expansion in ZnSe quantum dots, Materials Letters 65, 1625–1627.

[۱۲] Subhojyoti Sinha, Sanat Kumar Chatterjee, Jiten Ghosh, Ajit Kumar Meikap, (2015). Electrical transport properties of consolidated ZnSe quantum dots at and above room temperature, Current Applied Physics 15, 555-562.

[۱۳] Karsten Klauke, Dzmitry H. Zaitsau & et al, (2018). Thermodynamic properties of selenoether-functionalized ionic liquids and their use for the synthesis of zinc selenide nanoparticles, Dalton Trans., 47, 5083

[۱۴] I. K. El Zawawi & K. Sedeek, A. Adam & Manal A. Mahdy. (2010). Structural and ESR analysis of The prepared $Zn_{1-x}Mn_xSe$ compounds. *конденсированные среды и межфазные границы. Том 12, № 1, С. 9—16.*

[۱۵] K. Senthilkumar & T. Kalaivani & S. Kanagesan & V. Balasubramanian. (2012). Synthesis and characterization studies of ZnSe quantum dots. Mater Electron 23:2048–2052.

[۱۶] S. Venkatachalam & D. Mangalaraj & Sa. K. Narayandass & K. Kimb, J. Yi, Structure. (2005). Optical and electrical properties of ZnSe thin films. Physica B 358 27–35.

[۱۷] B. D. Cullity. (1978). Elements of X-RAY Diffraction. Second Edition, Department of Metallurgical Engineering and Materials Science University of Nôtre Dame, Library of Congress Catalog Card No. 77-73950.

[۱۸] A. E. Ross & D. G. McCulloch & D. R. McKenziea. (2020). Extending the Debye scattering equation for diffraction from a cylindrically averaged group of atoms: detecting molecular orientation at an interface. Acta Cryst. A 76, 468–473.

[۱۹] B.D. Cullity S.R. Stock. (2014). Elements of X-Ray Diffraction. Third Edition, ISBN 10: 1-292-04054-8, ISBN 13: 978-1-292-04054-7.

[۲۰] B.D. Hosseini Moradi, S. A. and Faghani, G. (2026). Synthesis and evaluation the microstructure and electrochemical properties of rGO-ZIF-8 hybrid nanocoating created on aerospace steel. *Aerospace Defense*, 4(4), 1-20.