

DOI:10.22144/ctu.jvn.2022.007

NGHIÊN CỨU GIẢI PHÁP XỬ LÝ PHỔ NHIỄU XẠ TIA X BẰNG PHẦN MỀM PYTHON

Nguyễn Duy Sang*

Khoa Sư phạm, Trường Đại học Cần Thơ

*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Nguyễn Duy Sang (email: ndsang@ctu.edu.vn)

Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 09/08/2021

Ngày nhận bài sửa: 08/10/2021

Ngày duyệt đăng: 26/02/2022

Title:

Studies on X-ray diffraction (XRD) spectra using Python software

Từ khóa:

Cấu trúc, máy học, phổ nhiễu xạ tia X, Python, vật liệu

Keywords:

Machine learning, materials, Python, structure, X-ray diffraction

ABSTRACT

X-ray diffraction (XRD) spectra obtained from X-ray diffraction spectrometer are often applied in the quantitative study of the structure of powder samples. The XRD spectrum investigation is based on the deviation angle between the incident ray and the diffraction ray of each material to determine its structural composition. Each XRD will be the dependence of the diffraction intensity on twice the diffraction angle having a characteristic pattern according to the spectral peaks. In this article, XRD spectrum is simulated, analyzed and processed by Python software. The XRD spectrum obtained from the experiment consists of many complex peaks that are processed and identified the characteristic peaks for the crystal. The results show that chili powder has a main peak located at the diffraction angle of about 22.010, indicating that the chili powder contains silicate minerals to be determined. Simulation and experimental data will initially be processed to approach machine learning to evaluate the obtained results.

TÓM TẮT

Phổ nhiễu xạ tia X (XRD) thu được từ máy quang phổ nhiễu xạ tia X thường ứng dụng trong nghiên cứu định lượng cấu trúc của mẫu dạng bột. Việc khảo sát phổ XRD dựa vào góc lệch giữa tia tới và tia nhiễu xạ của mỗi loại vật liệu để xác định thành phần cấu trúc của nó. Mỗi phổ XRD sẽ là sự phụ thuộc của cường độ nhiễu xạ vào 2 lần góc nhiễu xạ có dạng đặc trưng theo các đỉnh phổ. Trong bài viết này, phổ XRD được mô phỏng, phân tích và xử lý bằng phần mềm Python. Phổ XRD thu được từ thực nghiệm gồm nhiều đỉnh phức tạp được xử lý và xác định các đỉnh đặc trưng cho tinh thể. Kết quả cho thấy bột ớt có một đỉnh chính nằm ở góc nhiễu xạ khoảng 22,010 chứng tỏ bên trong bột ớt có chứa khoáng chất silicat cần xác định. Các số liệu mô phỏng và thực nghiệm bước đầu sẽ được xử lý tiếp cận với máy học để đánh giá kết quả thu được.

1. GIỚI THIỆU

Nhiễu xạ tia X (XRD) là hiện tượng các chùm tia X nhiễu xạ trên các mặt tinh thể của chất rắn do tính tuần hoàn của cấu trúc tinh thể tạo nên các cực đại và cực tiểu nhiễu xạ. Tập hợp các phản xạ hay

các tán xạ đàn hồi từ một họ mặt phẳng nguyên tử song song trong tinh thể đảm bảo điều kiện giao thoa tăng cường sẽ thu được các chùm tia X nhiễu xạ theo các hướng xác định, đặc trưng cho tinh thể. Các tia nhiễu xạ này có thể được ghi lại dưới dạng ảnh nhiễu trên phim hoặc được vẽ thành giản đồ nhiễu xạ. Hiện

tượng XRD được giải thích bởi William Henry Bragg và William Lawrence Bragg (hai nhà vật lý người Anh, giải thưởng Nobel vật lý năm 1915).

Phương pháp nhiễu xạ tia X thường được dùng để phân tích mẫu với lượng rất nhỏ mà không cần phải phá hủy mẫu, thời gian phân tích rất nhanh. Phân tích lớp màng mỏng trên bề mặt vật liệu ở góc quét hẹp, phân tích vật liệu mới, xác định cấu trúc tinh thể, tối ưu hóa các hằng số mạng tinh thể bằng thuật toán lý thuyết, tính toán kích thước và sức căng của mạng tinh thể, theo dõi phản ứng tổng hợp hóa chất rắn (Alderton, 2021).

Nghiên cứu xác định thực phẩm đã chiếu xạ bằng phương pháp nhiệt phát quang cho thấy mẫu vật liệu cần có các khoáng chất silicat có thể tách được. Việc xác định sự có mặt của silicat trong mẫu có thể được xác định bằng phương pháp nhiễu xạ XRD. Số liệu thu được từ thiết bị XRD là các thông số về góc nhiễu xạ và cường độ. Phổ XRD thu được chứa thông tin của các đỉnh phổ và trong đó có đỉnh phổ của khoáng silicat cần xác định. Tuy nhiên, các mẫu vật liệu thường không tinh khiết và chứa rất nhiều tạp chất trong nó. Khi đó, phổ XRD thu được sẽ có rất nhiều cường độ đỉnh theo góc nhiễu xạ chồng chập nhau. Với việc xử lý phổ thông thường, phổ XRD không hiển thị rõ ràng các đỉnh có cường độ đặc trưng cho tinh thể. Do đó, với phần mềm Python, việc xử lý phân tích phổ XRD mang lại nhiều kết quả khả quan hơn. Các đỉnh chồng chập được phân tách và xử lý loại bỏ để giữ lại các đỉnh phù hợp. Trong nghiên cứu này, việc phân tích, xử lý và mô phỏng phổ XRD được thực hiện nhằm xác định sự có mặt của khoáng chất trong mẫu.

2. VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP

2.1. Phần mềm Python

Python là ngôn ngữ lập trình hướng đối tượng cấp cao được tạo ra bởi Guido van Rossum. Python sử dụng cơ chế cấp phát bộ nhớ tự động, có cấu trúc dữ liệu cấp cao và cách tiếp cận đơn giản nhưng hiệu quả đối với lập trình hướng đối tượng.

Cú pháp lệnh của Python rất rõ ràng, cách cài đặt cũng rất đơn giản. Để cài đặt Python vào trang web: <https://www.python.org/downloads/> tải về phiên bản phù hợp với hệ điều hành đang sử dụng và cài đặt. Sau khi tải về thành công, tại cửa sổ cmd của Python thực hiện câu lệnh: `print ("Hello Python")`, Python sẽ in ra màn hình dòng Hello Python.

Python có nhiều thư viện được phát triển dưới dạng mã nguồn mở, rất phổ biến và hữu ích trong phân tích và đặc biệt với xử lý phổ. Gói Numpy giúp thao tác với các mảng đa chiều, sinh dữ liệu và thực hiện các phép biến đổi dữ liệu các hàm toán học. Gói Matplotlib giúp mô phỏng, phân tích dữ liệu, vẽ các biểu đồ, đồ thị. Gói Pandas giúp tổ chức, đi sâu, trình bày và thao tác đơn giản hơn với dữ liệu. Thư viện SciPy gồm các gói dùng cho đại số tuyến tính, tích hợp và thống kê. TensorFlow là một thư viện máy học được dùng trong Python giúp việc phân tích và mô phỏng dữ liệu hiệu quả và thực tế hơn (Fredericks et al., 2021). Scikits được thiết kế cho các chức năng chuyên biệt như xử lý ảnh và hỗ trợ máy học trong Python.

Các thư viện có thể được nạp vào Python như sau:

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.gridspec as gridspec
```

2.2. Thiết bị đo phổ XRD

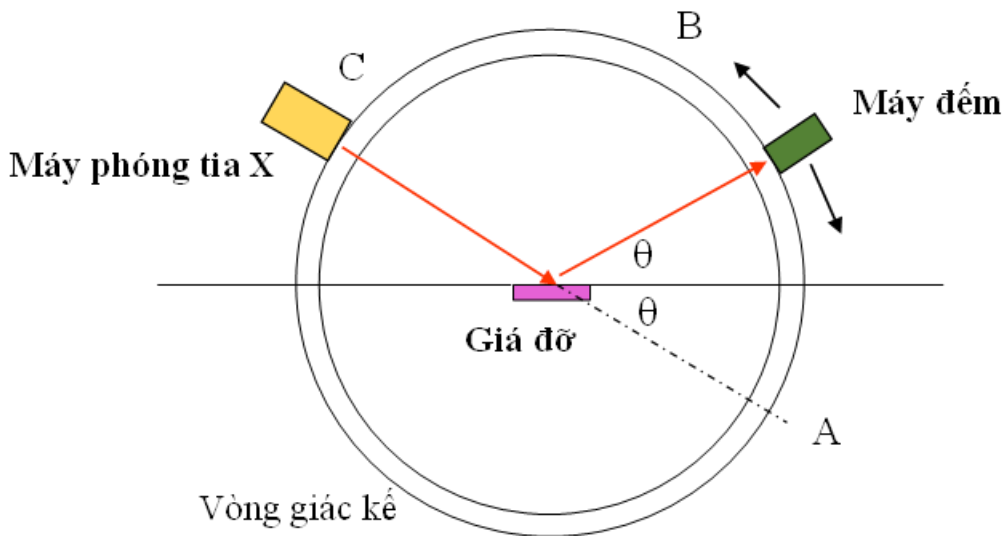
Thiết bị XRD được thiết kế trong vỏ bọc bằng thép với cửa lùa được lót chì để hệ thống thực sự an toàn về mặt bức xạ. Không gian bên trong thiết bị XRD rộng rãi với hệ thống chiếu sáng cho phép quan sát dễ dàng hoạt động của hệ thống. Máy đo nhiễu xạ tia X được mô tả như Hình 1 (Nguồn: Trung tâm Dịch vụ Phân tích Thí nghiệm Thành phố Hồ Chí Minh). Máy đo nhiễu xạ tia X hiện nay có sự kết hợp giữa máy phóng tia X, máy đếm và máy tính.



Hình 1. Máy đo nhiễu xạ tia X (Nguồn: Case.vn)

Máy đếm được kết nối với giá đựng mẫu bằng một hệ thống cơ khí chính xác và chuyển động trên cung tròn ABC. Kết quả thu được là một giản đồ nhiễu xạ thể hiện mối quan hệ giữa cường độ (số

xung trên một đơn vị thời gian) và góc 2θ (độ). Sơ đồ nguyên lý máy đo nhiễu xạ tia X được mô tả trong Hình 2.



Hình 2. Sơ đồ nguyên lý máy đo nhiễu xạ tia X

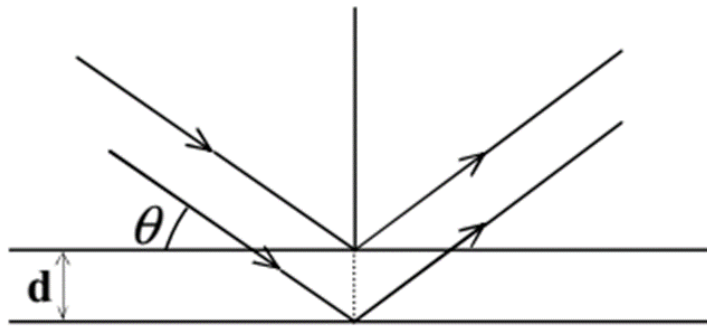
2.3. Nguyên tắc đo phổ XRD

Phổ nhiễu xạ là sự phụ thuộc của cường độ nhiễu xạ vào 2 lần góc nhiễu xạ (2θ). Bước sóng của chùm tia X là λ , góc phản xạ θ và khoảng cách giữa hai mặt phẳng song song d liên hệ với nhau qua phương trình Vuff-Bragg:

$$n\lambda = 2d\sin\theta \quad (1)$$

Trong đó, n là số nguyên được gọi là bậc nhiễu xạ.

Sơ đồ tia tới và tia phản xạ trên tinh thể được chỉ ra ở Hình 3.



Hình 3. Sơ đồ tia tới và tia phản xạ trên tinh thể

Phương trình Vulf- Bragg là phương trình cơ bản để nghiên cứu cấu trúc tinh thể. Dựa vào góc θ và λ theo công thức (1) để tìm d , so sánh giá trị d vừa tìm được với giá trị d chuẩn sẽ xác định được thành phần cấu trúc mạng tinh thể của chất cần nghiên cứu.

2.4. Phân tích và xử lý số liệu phổ XRD thực nghiệm

Phổ XRD bao gồm các đỉnh có cường độ khác nhau. Mỗi đỉnh tương ứng với một phản xạ của họ mặt nào đó. Từ phổ XRD sẽ thu được các thông tin về khoảng cách giữa các mặt, cường độ tương đối của mỗi đỉnh, qua đó xác định được: kích thước, hình dạng của ô đơn vị, số nguyên tử và vị trí các nguyên tử trong ô đơn vị. Khoảng cách d giữa các mặt mạng phụ thuộc vào kích thước ô cơ sở cho biết vị trí của các đỉnh. Bề rộng của đỉnh và hình dạng của đỉnh phụ thuộc vào điều kiện đo cũng như một số thuộc tính của vật liệu chẳng hạn như kích thước

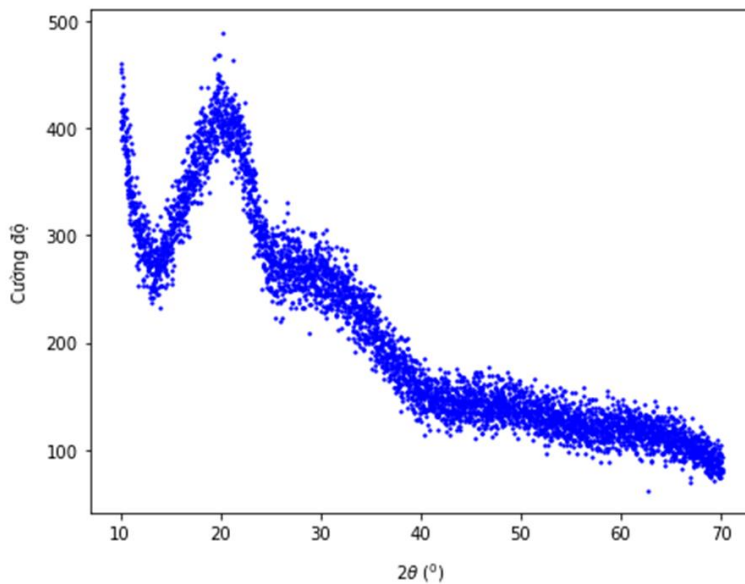
hạt. Cường độ của đỉnh phụ thuộc vào sự sắp xếp cấu trúc tinh thể, vị trí của các nguyên tử trong ô cơ sở và sự dao động nhiệt của các nguyên tử.

Việc phân tích phổ XRD để xác định các vật liệu chưa biết, kiểm tra sự đơn pha (độ tinh khiết), xác định kích thước tinh thể, nghiên cứu tính chất biến đổi nhiệt của vật liệu, phân tích định lượng, xác định cấu trúc tinh thể.

Các số liệu thu được từ máy đo phổ nhiễu xạ XRD thường chứa hai thông số là cường độ và hai lần góc nhiễu xạ. Dữ liệu có thể được lưu trữ là tập tin Excel có đuôi “.csv”.

Để đưa dữ liệu vào Python, ta dùng cú pháp:

```
data_set = pd.read_csv(file_string).to_numpy()
file_string = r'data.csv' # data.csv: tập tin cần xử lý
```



Hình 4. Phổ XRD của mẫu bột ốt chưa được xử lý

Phổ XRD của một loại mẫu bột ốt được đo tại Phòng thí nghiệm nhiễu xạ Tia X thuộc Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ. Phổ XRD của bột ốt được biểu diễn trên Hình 4 bao gồm góc 2θ và cường độ. Phổ XRD của bột ốt chưa được xóa nhiễu nền, cần được phân tích và xử lý và tìm các thông số mẫu.

Các số liệu từ phổ XRD cần được phân tích và xử lý để có thể xác định được loại vật liệu. Bước đầu tiên trong xử lý phổ XRD thu được là xóa nhiễu nền sau đó mới tiến hành xác định các thông số khác. Phổ XRD của mẫu bột ốt đã xóa nhiễu được biểu diễn bởi Hình 5. Phổ XRD của mẫu bột ốt là dạng mẫu bao gồm rất nhiều khoáng chất khác nhau nên

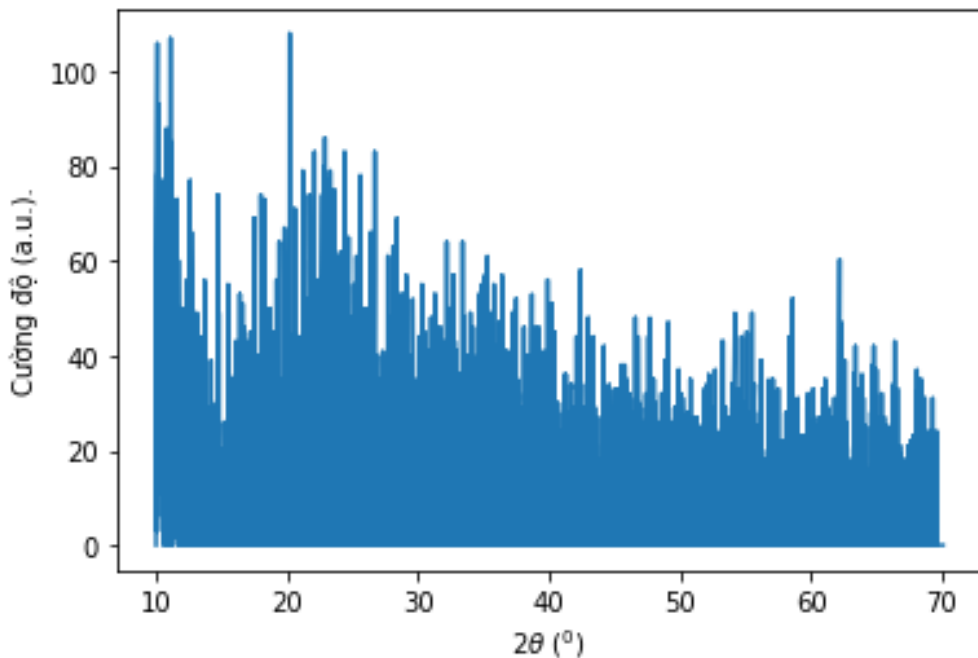
có rất nhiều đỉnh. Vì vậy, để kiểm tra mẫu có mặt khoáng chất thì cần xem xét các đỉnh phổ của chất đó với phổ XRD chuẩn.

Để khai thác các gói thư viện có sẵn trong Python, cú pháp sau được sử dụng:

```
pip install package-name # package-name là tên hàm cần dùng
```

```
pip install xrayutilities # xrayutilities chứa các câu lệnh về XRD để xử lý phổ XRD.
```

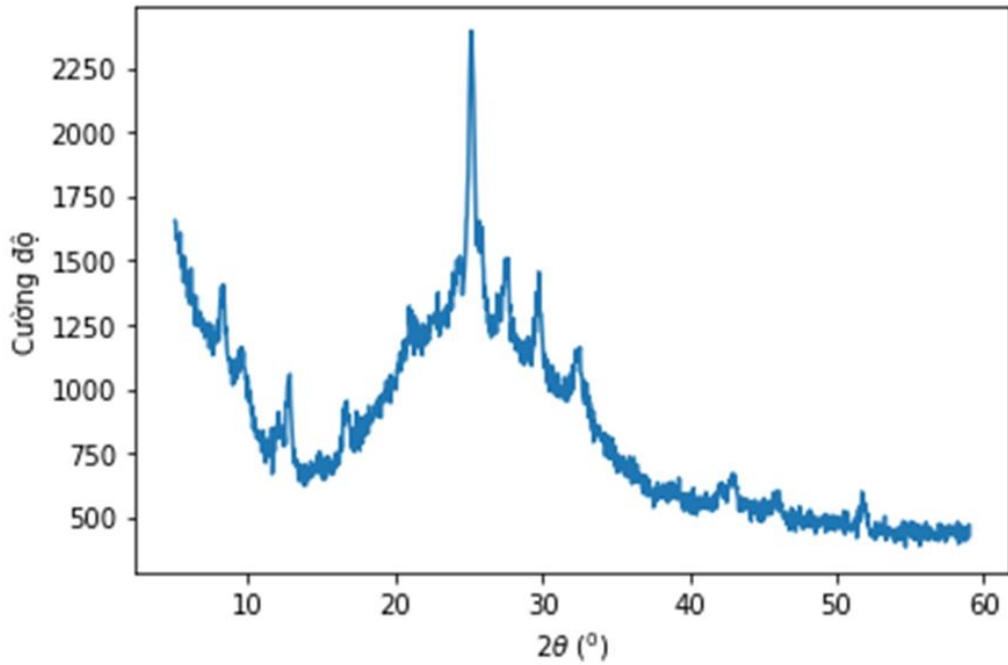
Các công cụ hỗ trợ phân tích và xử lý dữ liệu trong Python rất đa dạng và miễn phí, người sử dụng có thể tải về và cài đặt.



Hình 5. Phổ XRD của mẫu bột ốt đã được xử lý xóa nhiễu nền

Trong nghiên cứu này, số liệu của mẫu $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ và việc xử lý phổ XRD với máy học được tham khảo và tra cứu từ nhóm PVLab (Oviedo

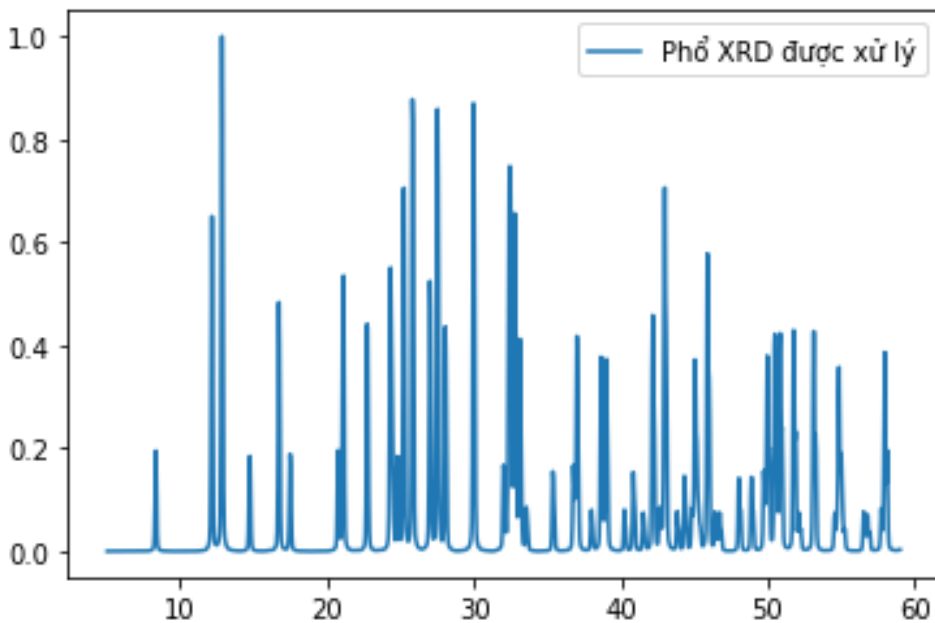
et al., 2019). Phổ XRD của mẫu $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ bao gồm rất nhiều đỉnh và được biểu diễn như Hình 6.



Hình 6. Phổ XRD của $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ chưa được xử lý

Các đỉnh và so sánh các đỉnh phổ XRD giữa mẫu cần khảo sát và mẫu chuẩn cần được tìm để biết

được loại vật liệu cần nghiên cứu. Việc tìm các đỉnh của phổ XRD của mẫu $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ được biểu diễn trên Hình 7.



Hình 7. Phổ XRD của $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ được xử lý

Các đỉnh phổ XRD của mẫu $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ được chọn sao cho phù hợp, các đỉnh không phù hợp sẽ

được loại bỏ. Việc loại bỏ các đỉnh không phù hợp của phổ XRD của mẫu $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ được biểu diễn trên Hình 8.

2.5. Mô phỏng phổ XRD bằng phần mềm Python

Phổ XRD có thể được làm khớp với đỉnh theo hàm Gauss, Lorentzians, hoặc Voigt. Trong nghiên cứu này, phổ XRD được làm khớp với hàm Gauss theo phương trình:

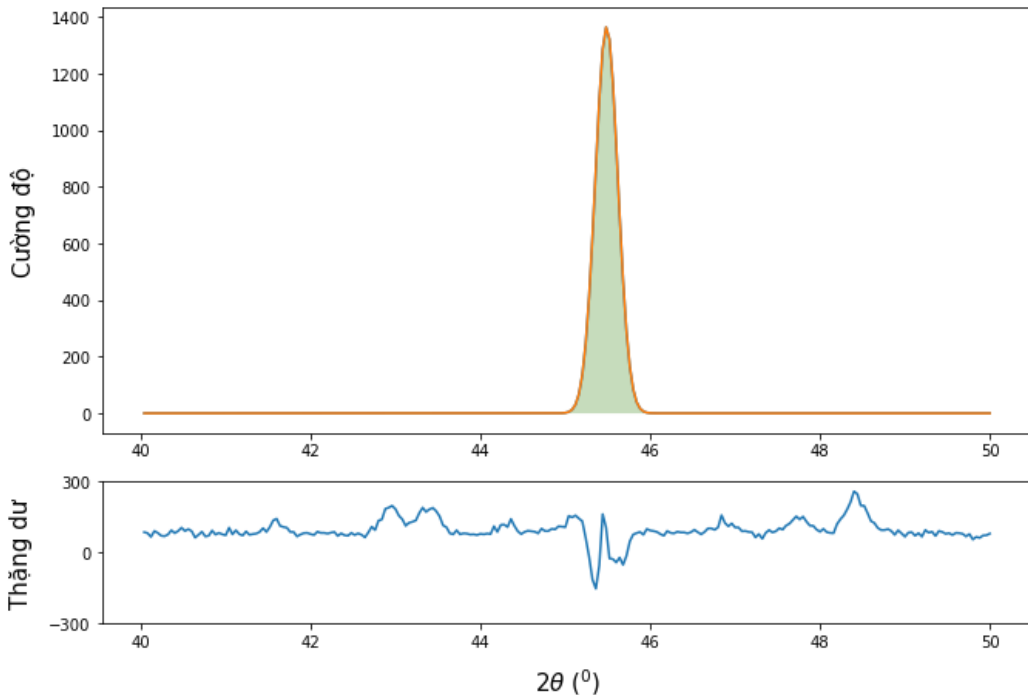
$$f(x) = Ae^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (2)$$

Trong đó, A là cường độ cực đại của đỉnh cần làm khớp, μ là trị trung bình của phân bố Gauss, σ là bề rộng của đỉnh.

Để đánh giá sự phù hợp giữa phổ thực nghiệm và phổ mô phỏng, hệ số FOM (Figure Of Merit) được đưa ra. Hệ số FOM được cho bởi:

$$FOM = \frac{\sum_p |y_{ex} - y_{fit}|}{\sum_p y_{fit}}$$

trong đó, y_{ex} là cường độ phổ XRD thực nghiệm, y_{fit} là cường độ phổ XRD theo mô phỏng.



Hình 9. Phổ XRD được mô phỏng với một đỉnh đơn

Phổ XRD với một đỉnh đơn được mô phỏng theo hàm Gauss được biểu diễn trong Hình 9. Phổ được mô phỏng với các thông số bao gồm góc 2θ là $45,48^\circ$, cường độ đỉnh cực đại là 1469,19. Phổ có bề rộng được xác định dựa vào thông số σ và được điều chỉnh cho phù hợp tương ứng với phổ cần so sánh.

Hệ số FOM càng nhỏ thì phổ được làm khớp càng phù hợp với phổ thực nghiệm.

Trong Python, để khai báo hàm ta dùng cú pháp:

```
def ten_ham(param...): # ten_ham là tên của hàm muốn đặt, param... là các tham số muốn truyền vào hàm, nếu không có tham số thì để trống.
```

```
def gaussian(x, A, mu, sigma): # khai báo hàm Gauss
    return A*np.exp(-(x-mu)**2.0)/sigma**2.0 # trả về kết quả hàm
```

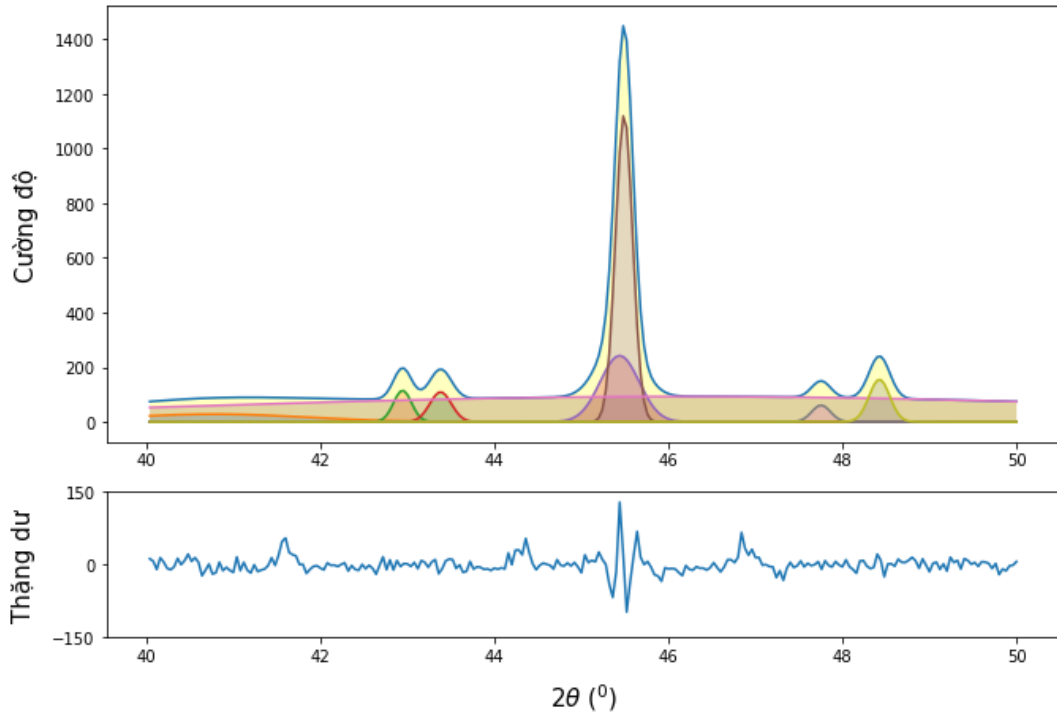
Phổ XRD với một đỉnh

Hai thông số chính là cường độ và 2θ được chọn để mô phỏng phổ XRD với một đỉnh đơn. Trong Python, các thông số mô phỏng được nhập vào như sau:

```
initials = [[1469.19, 45.48, 0.18]] # initials tên biến
```

Phổ XRD với nhiều đỉnh

Trong thực tế, phổ XRD bao gồm rất nhiều đỉnh phức tạp, để có phổ XRD như thực nghiệm ta cần tổng hợp các phổ XRD từ phổ của nhiều đỉnh đơn.



Hình 10: Phổ XRD của $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ được mô phỏng từ nhiều đỉnh

Phổ XRD với nhiều đỉnh đơn được mô phỏng và tổng hợp từ hàm Gauss được biểu diễn trong Hình 10.

Trong Python, các thông số mô phỏng được nhập vào như sau:

```
initials = [ [143.19, 41.93, 0.18], [189.19, 43.53, 0.18], [142.21, 44.33, 0.18], [1469.01, 45.48, 0.18], [158.33, 46.84, 0.18], [248.52, 48.43, 0.18] ]
```

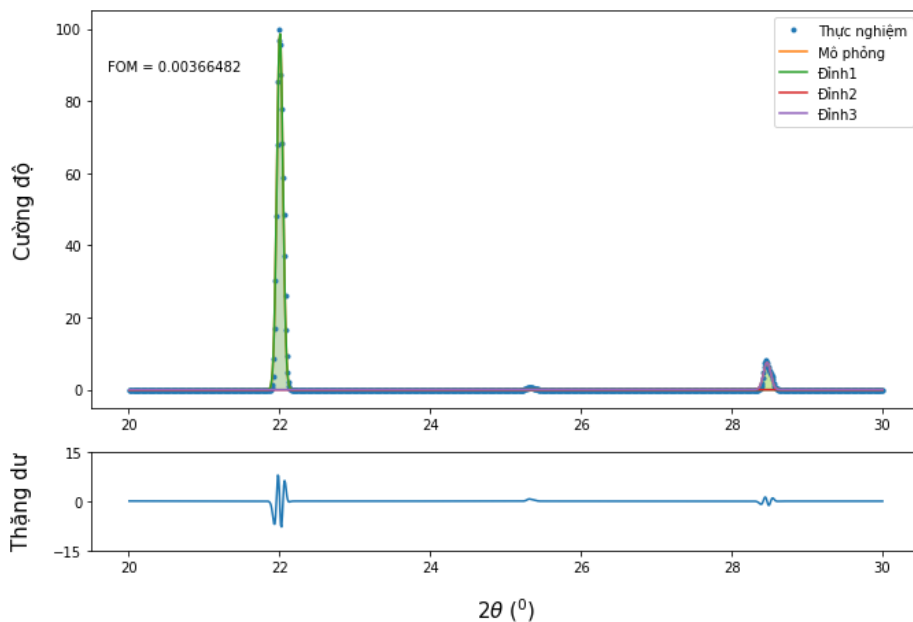
Phổ XRD được mô phỏng với các thông số bao gồm sáu đỉnh tương ứng với góc 2θ và cường độ đỉnh cực đại. Bề rộng của mỗi phổ được xác định qua thông số σ và được điều chỉnh cho phù hợp với phổ XRD thực nghiệm.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Trong lĩnh vực xác định chiều xạ thực phẩm, sự có mặt của silicat có trong thực phẩm cần được

khẳng định hay không cần dùng phương pháp XRD để phân tích. Vì vậy, ở đây, bột silicat cristobalite được sử dụng cho nghiên cứu (Downs et al., 1993). Phổ XRD của silicat cristobalite là phổ có nhiều đỉnh nhưng chỉ có một đỉnh chính duy nhất ở vị trí $2\theta = 22,01^\circ$ có cường độ mạnh, còn các đỉnh còn lại ứng với các góc 2θ khác có cường độ rất nhỏ.

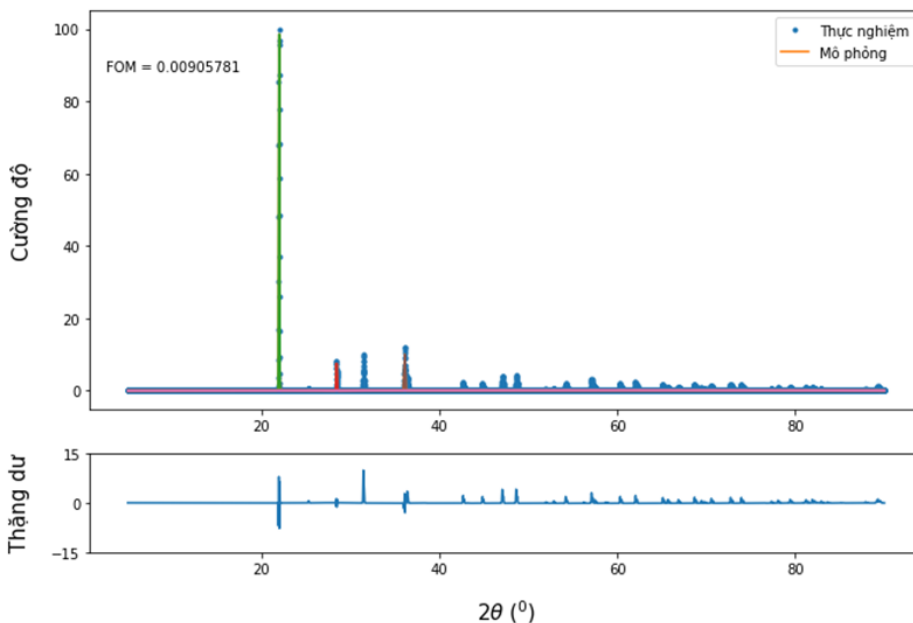
Đầu tiên, phổ XRD thực nghiệm và mô phỏng được biểu diễn ở trong khoảng góc 2θ từ 20° đến 30° để đối chiếu và so sánh lẫn nhau (Hình 11). Kết quả cho thấy phổ XRD của mô phỏng và thực nghiệm tương đồng với nhau. Hệ số làm khớp phổ (FOM) nhỏ cho thấy sự khác biệt không lớn giữa phổ mô phỏng và thực nghiệm. Kết quả mô phỏng cho thấy phổ XRD nằm ở vị trí đỉnh $2\theta = 22,01^\circ$ có cường độ cực đại, các đỉnh còn lại có cường độ rất nhỏ, không đáng kể.



Hình 11: Phổ XRD của silica cristobalite với 2θ từ 20-30°

Việc mô phỏng và thực nghiệm phổ XRD của silicat cristobalite trên toàn bộ góc nhiễu xạ 2θ được cho bởi Hình 12. Kết quả cho thấy mô phỏng và thực

nh nghiệm là tương đồng nhau, FOM = 0,09, đỉnh chính của phổ XRD của silicat cristobalite nằm ở 22,01°.



Hình 12: Phổ XRD của khoáng silica cristobalite

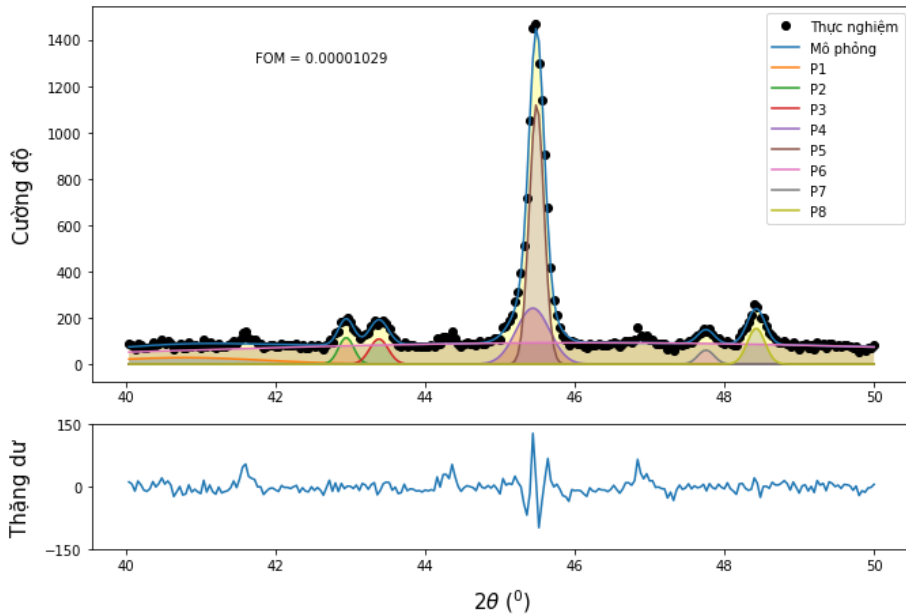
Kế đến, để đánh giá đầy đủ hơn việc xử lý và mô phỏng phổ XRD, phổ XRD của tinh thể Cs₂AgBiBr₆ được sử dụng (Oviedo et al., 2019). Đây là dạng phổ XRD có nhiều đỉnh chính với các cường độ cực đại khác nhau. Đầu tiên, phổ XRD thực nghiệm và mô

phỏng được biểu diễn ở trong khoảng góc 2θ từ 40 đến 50° để đối chiếu và so sánh với nhau (Hình 13).

Kết quả làm khớp phổ, hệ số làm khớp phổ (FOM) rất nhỏ cho thấy sự khác biệt không lớn giữa

phổ mô phỏng và thực nghiệm. Kết quả mô phỏng cho thấy phổ XRD nằm ở vị trí đỉnh $2\theta = 45,48^\circ$ có

cường độ cực đại, các đỉnh còn lại có cường độ rất nhỏ, không đáng kể.



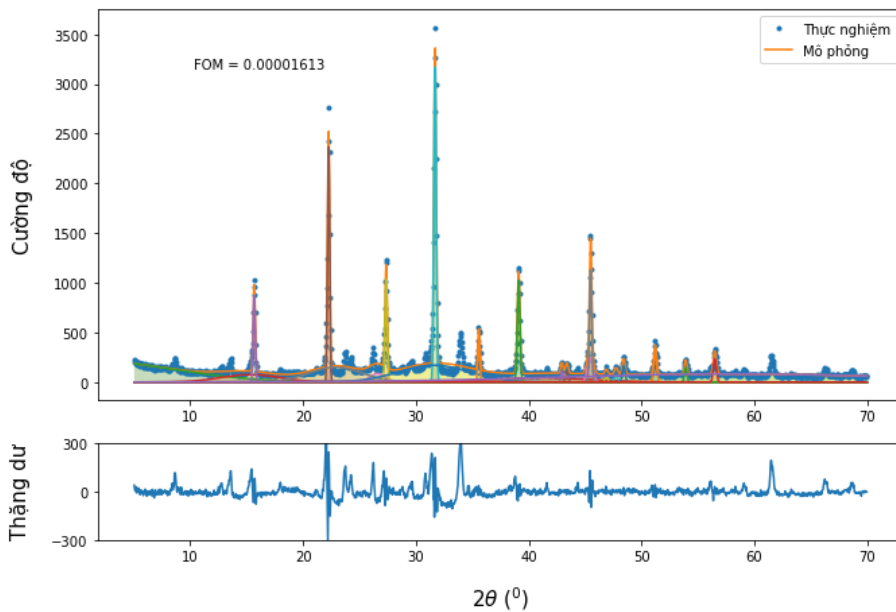
Hình 13: Phổ XRD của tinh thể $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ với 2θ từ $40-50^\circ$

Việc mô phỏng và thực nghiệm phổ XRD của $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ trên toàn bộ góc nhiễu xạ 2θ được thể hiện ở

Hình 13. Kết quả cho thấy mô phỏng và thực nghiệm của phổ XRD của cristobalite là tương đồng nhau, FOM = 0,00001, các đỉnh chính nằm ở vị trí 2θ lần lượt là 15,61, 22,20, 27,43, 31,84, 39,19, 45,48^o tương ứng với các cường độ 1023,11,

1674,19, 1210,21, 1474,01, 1153,33, 1469,52; các đỉnh còn lại của phổ XRD của cristobalite tương ứng với các vị trí 2θ khác có cường độ thấp.

Các kết quả mô phỏng phổ XRD của mẫu silica cristobalite và $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ được thể hiện ở Bảng 1.



Hình 14: Làm khớp phổ XRD của tinh thể $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$

Bảng 1. Kết quả mô phỏng của mẫu silica cristobalite và Cs₂AgBiBr₆

| Mẫu | Đỉnh chính | Vị trí đỉnh 2θ (°) | Cường độ đỉnh | FOM |
|-------------------------------------|------------|--------------------|---------------|---------|
| cristobalite | 1 | 22,01 | 100,19 | 0,009 |
| Cs ₂ AgBiBr ₆ | 1 | 15,61 | 1023,11 | 0,00001 |
| | 2 | 22,20 | 1674,19 | |
| | 3 | 27,43 | 1210,21 | |
| | 4 | 31,84 | 1474,01 | |
| | 5 | 39,19 | 1153,33 | |
| | 6 | 45,48 | 1469,52 | |

Như vậy, đối với silica cristobalite, phổ XRD có một đỉnh chính còn đối với tinh thể Cs₂AgBiBr₆ thì phổ XRD có sáu đỉnh chính.

Trong nghiên cứu này, phổ XRD đã được phân tích, xử lý bằng phần mềm Python. Kết quả phân tích cho thấy phổ XRD là dạng phổ tuân theo hàm Gauss gồm hai trục với góc nhiễu xạ và cường độ có nhiều đỉnh chính. Khi phân tích, phổ nhiễu xạ và các đỉnh phổ có cường độ thấp cần được loại bỏ. Việc xử lý phổ XRD bằng phần mềm Python rất thuận lợi do nó chứa các thư viện hỗ trợ lớn từ cộng đồng người dùng đưa lên, có thể tải về và cài đặt miễn phí.

Các mẫu thực nghiệm là hai mẫu silica cristobalite và Cs₂AgBiBr₆ được mô phỏng và dựa vào hệ số sai khác phổ FOM để đánh giá quá trình mô phỏng so với thực nghiệm. Ngoài ra, thông số thặng dư (Residuals) cũng là một công cụ để đánh giá quá trình sai khác giữa mô phỏng và thực nghiệm được thể hiện bằng hình ảnh cuối đồ thị (Hình 13). Phương pháp mô phỏng phổ XRD bằng phần mềm Python có thể được dùng để phân tích, đánh giá kết quả thực nghiệm, tính các thông số của mẫu vật liệu.

Trong nghiên cứu xác định thành phần định tính của vật liệu, việc xác định trong mẫu có sự xuất hiện

của khoáng chất, hợp chất nào đó một cách cụ thể đóng vai trò rất quan trọng. Từ phổ XRD của mẫu bột ớt ban đầu có dạng phức tạp, đa đỉnh, thông qua quá trình phân tích, xử lý và mô phỏng, silicat cristobalite có trong mẫu bột ớt được xác định trong nghiên cứu, làm tiền đề cho nghiên cứu xác định thực phẩm chiếu xạ bằng cơ chế nhiệt phát quang (Sang, 2013).

4. KẾT LUẬN

Bài báo trình bày về phương pháp đo phổ XRD và ứng dụng của nó trong khoa học vật liệu. Phần mềm Python được sử dụng để phân tích, xử lý và mô phỏng các đỉnh phổ XRD. Kết quả mô phỏng và thực nghiệm là tương đồng với nhau thể hiện qua hệ số làm khớp phổ FOM nhỏ. Kết quả phổ XRD của mẫu bột ớt có một đỉnh chính nằm ở vị trí 2θ = 22,01° có cường độ cực đại cho thấy trong bột ớt có thành phần của khoáng chất silicat. Nghiên cứu cho thấy việc phân tích, xử lý và mô phỏng bằng phần mềm Python đối với phổ XRD có thể xác định được sự có mặt của khoáng chất bên trong mẫu vật liệu làm cơ sở cho các nghiên cứu liên quan đến vật liệu, xác định mẫu thực phẩm đã chiếu xạ.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Alderton, D. (2021). X-Ray Diffraction (XRD). *Encyclopedia of Geology (2nd ed.)*. Oxford: Academic Press. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102908-4.00178-8>.

Downs, R. T., Bartelmehs, K. L., Gibbs, G. V., & Boisen, M. B. (1993). Interactive software for calculating and displaying X-ray or neutron powder diffractometer patterns of crystalline materials. *American Mineralogist*, 78(9-10), 1104-1107.

Fredericks, S., Parrish, K., Sayre, D., & Zhu, Q. (2021). PyXtal: A Python library for crystal structure generation and symmetry analysis. *Computer Physics Communications*, 261.

Oviedo, F., Ren, Z., Sun, S., Settens, C., Liu, Z., Hartono, N. T., Ramasamy, S., DeCost, B. L., Tian, S. I. P., Romano, G., Kusne, A. G., & Buonassisi, T. (2019). Fast and interpretable classification of small X-ray diffraction datasets using data augmentation and deep neural networks. *npj Computational Materials*, 5(60), 1-9. doi:<https://10.1038/s41524-019-0196-x>

Sang, N. D. (2013). Nghiên cứu ứng dụng hiện tượng nhiệt huỳnh quang trong việc xác định sản phẩm chiếu xạ ở Việt Nam. *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ*, 29, 105-110.